



Europäisches Patentamt
European Patent Office
Office européen des brevets

11) Veröffentlichungsnummer:

0 337 263
A2

12)

EUROPÄISCHE PATENTANMELDUNG

21) Anmeldenummer: 89105924.8

51) Int. Cl. 4: C07D 261/18, C07D 275/02,
A01N 43/80, C07D 413/12,
C07D 413/04, C07D 417/12

22) Anmeldetag: 05.04.89

Patentansprüche für folgenden Vertragsstaat: ES.

30) Priorität: 13.04.88 DE 3812225

43) Veröffentlichungstag der Anmeldung:
18.10.89 Patentblatt 89/42

64) Benannte Vertragsstaaten:
BE CH DE ES FR GB IT LI NL

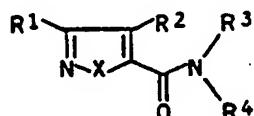
71) Anmelder: BASF Aktiengesellschaft
Carl-Bosch-Strasse 38
D-6700 Ludwigshafen(DE)

72) Erfinder: Freund, Wolfgang, Dr.
Johann-Gottlieb-Fichte-Strasse 71
D-6730 Neustadt(DE)
Erfinder: Kuekenhoechner, Thomas, Dr.

Seidelstrasse 2
D-6710 Frankenthal(DE)
Erfinder: Hamprecht, Gerhard, Dr.
Rote-Turm-Strasse 28
D-6940 Weinheim(DE)
Erfinder: Wuerzer, Bruno, Dr.
Ruedigerstrasse 13
D-6701 Otterstadt(DE)
Erfinder: Westphalen, Karl-Otto, Dr.
Mausbergweg 58
D-6720 Speyer(DE)
Erfinder: Meyer, Norbert
Dossenheimer Weg 22
D-6802 Ladenburg(DE)
Erfinder: Theobald, Hans, Dr.
Quelchstrasse 6
D-6703 Limburgerhof(DE)

54) Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäure-amide.

57) Die Erfindung betrifft Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel



EP 0 337 263 A2

in der

X Sauerstoff oder Schwefel,

R¹ Wasserstoff, gegebenenfalls substituiertes Alkyl, Alkoxy,

gegebenenfalls substituiertes Cycloalkyl,

einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, der substituiert sein kann,
oder gegebenenfalls substituiertes Phenyl,

R² Formyl, 4,5-Dihydro-oxazol-2-yl oder einen Rest der Formel COYR⁵ oder CONR⁶R⁷,
wobei

Y für Sauerstoff oder Schwefel,

R⁵ für Wasserstoff, gegebenenfalls substituiertes Alkyl,

gegebenenfalls substituiertes Alkenyl, Halogenalkenyl,

gegebenenfalls substituiertes Alkynyl,

Cycloalkyl,

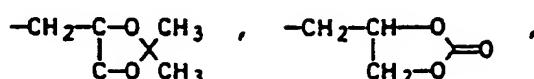
Cycloalkenyl,

gegebenenfalls substituiertes Phenyl,

einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff,

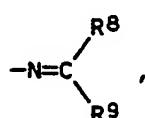
Cycloalkanimino, Phthalimido, Succinimido,

für die Reste



-CH₂-CH(OH)-CH₂(OH),

für ein Äquivalent eines Kations aus der Gruppe der Alkali-, Erdalkalimetalle, Mangan, Kupfer, Eisen, Ammonium und substituiertes Ammonium oder für den Rest



wobei R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander Alkyl, Alkoxyalkyl, Cycloalkyl, Phenyl, Furyl oder zusammen eine Methylenkette der Formel -(CH₂)_m- mit m = 4 bis 7 Kettengliedern bedeuten und R⁹ zusätzlich Wasserstoff bedeutet,

R⁶ für Wasserstoff, Alkyl oder Cycloalkyl und

R⁷ für Wasserstoff oder Alkyl stehen oder wobei

R⁶ und R⁷ eine Methylenkette mit 4 oder 5 Gliedern bilden,

R³ Wasserstoff,

gegebenenfalls substituiertes Cycloalkyl und

R⁴ Wasserstoff, Hydroxyl, Alkoxy,

gegebenenfalls substituiertes Alkyl,

gegebenenfalls substituiertes Alkenyl,

Alkynyl,

gegebenenfalls substituiertes Cycloalkyl,

Dialkylamino,

einen gegebenenfalls substituierten 3- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und gegebenenfalls durch Methyl substituierter Stickstoff, Naphthyl,

oder gegebenenfalls substituiertes Phenyl bedeuten

oder

R³ und R⁴ gemeinsam einen Rest der Struktur -(CH₂)_n- Y_p-(CH₂)_q-, bedeuten oder den Rest der Formel -(CH₂)₃-CO- bilden,

sowie ihre Verwendung zur Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwuchses.

Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide

Die vorliegende Erfindung betrifft substituierte Isoxazol- und Isothiazol-5-carbonsäureamide und ihre Verwendung zur Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwuchses.

5 Isoxazol- und Isothiazol-carbonsäuren bzw. deren Derivate sind bekannt. Dies. sind die 5-Aminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäure, der 5-Aminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäureethylester, das 4,5-Isothiazoldicarboxamid sowie die 5-Carbamoyl-4-isothiazolcarbonsäure (J. Chem. Soc. Perkin Trans. I, 1982, 2391; J. Heterocyclic. Chem. 22, 1561 (1985); J. Chem. Soc. 1959, 3961). Mögliche Verwendungen dieser Substanzen sind nicht beschrieben.

Es wurde gefunden, daß Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel Ia

10



15

in der

X Sauerstoff oder Schwefel,

R¹ Wasserstoff,

gegebenenfalls durch C₁-C₃-Alkoxy, C₁-C₃-Halogenalkoxy, Halogen, Cyano oder Phenyl, das durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Halogenalkylthio, Cyano oder Nitro substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy,

gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl oder Halogen substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl, einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, der durch C₁-C₄-Alkyl, Carboxyl oder C₁-C₄-Alkoxycarbonyl substituiert sein kann, oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,

R² Formyl, 4,5-Dihydro-oxazol-2-yl oder einen Rest der Formel COYR⁵ oder CONR⁶R⁷,

30 wobei

Y für Sauerstoff oder Schwefel,

R⁵ für Wasserstoff,

C₁-C₈-Alkyl, das durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxy, Halogen, Cyano, Hydroxy, Trimethylsilyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylamino, C₁-C₄-Dialkylamino, C₁-C₄-Alkylsulfinyl, C₁-C₄-Alkylsulfonyl, Carboxyl, C₁-C₄-Alkoxycarbonyl, C₁-C₄-Dialkylaminocarbonyl, C₁-C₄-Dialkoxyphosphonyl, Alkaniminoxy, Benzyloxy, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₃-Alkoxy oder Halogen substituiertes Benzoyl oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl, durch Thienyl, Furyl, Tetrahydrofuryl, Phthalimido oder Pyridyl substituiert sein kann,

gegebenenfalls durch Phenyl, das durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C₃-C₈-Alkenyl,

35 C₃-C₆-Halogenalkenyl,

gegebenenfalls durch Hydroxy oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₈-Alkinyl,

C₃-C₆-Cycloalkyl,

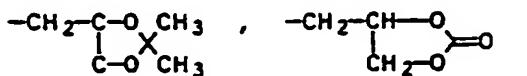
C₅-C₆-Cycloalkenyl,

40 gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkoxycarbonyl oder Acylamino substituiertes Phenyl,

einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff oder einen Benzotriazolrest,

45 C₆-C₇-Cycloalkanimino, Phthalimido, Succinimido,

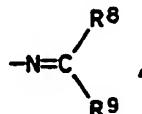
50 für die Reste



-CH₂-CH(OH)-CH₂(OH),

für ein Äquivalent eines Kations aus der Gruppe der Alkali-, Erdalkalimetalle, Mangan, Kupfer, Eisen, Ammonium und substituiertes Ammonium oder für den Rest

5



10

wobei R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander C₁-C₄-Alkyl, C₂-C₆-Alkoxyalkyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, Phenyl, Furyl oder zusammen eine Methylenkette der Formel -(CH₂)_m- mit m = 4 bis 7 Kettengliedern bedeuten und R⁹ zusätzlich Wasserstoff bedeutet,

R⁶ für Wasserstoff, C₁-C₈-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl und

15

R⁷ für Wasserstoff oder C₁-C₈-Alkyl stehen oder wobei

R⁶ und R⁷ eine Methylenkette mit 4 oder 5 Gliedern bilden,

R³ Wasserstoff,

gegebenenfalls durch Hydroxy, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Dialkylamino substituiertes C₁-C₈-Alkyl

20

oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, Halogen oder C₁-C₄-Halogenalkyl substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl und

R⁴ Wasserstoff, Hydroxyl, C₁-C₄-Alkoxy,

gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Dialkylamino, Halogen, C₃-C₆-Cycloalkyl oder Phenyl, das durch Halogen, Cyano, Nitro, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Halogenalkylthio substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl,

25

gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₁₀-Alkenyl oder C₃-C₁₀-Alkynyl,

gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl,

30

C₁-C₄-Dialkylamino, einen gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl oder Halogen substituierten 3- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und gegebenenfalls durch Methyl substituierter Stickstoff, Naphthyl,

35

oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro, Cyano, Formyl, C₁-C₆-Alkanoyl oder C₁-C₆-Halogenalkanoyl substituiertes Phenyl bedeuten

oder

40

R³ und R⁴ gemeinsam einen Rest der Struktur -(CH₂)_n- Y_p-(CH₂)_q-, wobei n und q 1, 2 oder 3, p 0 oder 1 und Y Sauerstoff, Schwefel oder N-Methyl bedeuten, oder den Rest der Formel

45

-(CH₂)₃-CO-

bilden,

sowie deren umweltverträgliche Salze, herbizid wirksam sind.

Die Methyl-, Alkoxy-, Alkenyl- und Alkinylreste für R¹, R³, R⁴, R⁵, R⁶ und R⁷ können unverzweigt oder verzweigt sein und enthalten vorzugsweise 1 bis 4 C-Atome. Entsprechendes gilt für die Alkylreste, die als Substituenten in den Resten R¹, R³, R⁴, R⁵, R⁶ und R⁷ enthalten sein können, sowie für die Alkylgruppen in den Halogenalkyl-, Alkoxy-, Halogenalkoxy-, Alkylthio-, Halogenalkylthio-, Dialkylamino-, Alkanoyl-, Halogenalkanoyl- und Alkoxy carbonylresten.

Als Halogensubstituenten kommen vorzugsweise Chlor substituenten in Betracht.

50

Die heterocyclischen Reste für R¹ sind gesättigt oder ungesättigt. In Betracht kommen beispielsweise Tetrahydropyranyl, Tetrahydrofuryl, Pyrazolyl, Thienyl, Furyl, Pyridyl und Tetrahydrofuryl. Diese Reste können durch C₁-C₄-Alkyl-, Carboxyl- oder C₁-C₄-Alkylcarbonylgruppen substituiert sein.

Die heterocyclischen Reste für R⁵ können gegebenenfalls gesättigt oder ungesättigt sein. Geeignete Reste sind Thienyl, Furyl, Tetrahydrofuryl, Triazolyl, Imidazolyl, Tetrahydropyranyl, Pyridyl, Morpholino und Piperidino.

55

Gesättigte oder ungesättigte heterocyclische Reste für R⁴ sind beispielsweise Tetrahydropyranyl, Tetrahydrofuryl, Thiazolyl, Pyridyl, Morpholino, Piperidino, Pyrimidyl.

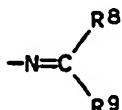
Die erfundungsgemäßen Verbindungen I können beispielsweise mit anorganischen und organischen Säuren oder mit Alkyhalogeniden Additionssalze bilden oder sie können, sofern einer der Substituenten

saure Eigenschaften hat, mit anorganischen und organischen Basen zu Salzen umgesetzt werden. Die entsprechenden Salze gehören ebenfalls zur Erfindung.

Als herbizide Wirkstoffe bevorzugte Isoxazol(isothiazol)-5-carbonsäureamide sind solche der Formel Ia, in der R³ Wasserstoff bedeutet.

5 Weiterhin sind Verbindungen der Formel Ia als Wirkstoffe bevorzugt, bei denen X Sauerstoff oder Schwefel, R¹ Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl, R² COYR⁵, R³ Wasserstoff, R⁴ C₁-C₄-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl bedeuten. Bei diesen Verbindungen bedeutet R⁵ vorzugsweise Wasserstoff, C₁-C₄-Alkyl, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder Halogen substituiertes Phenyl oder den Rest

10

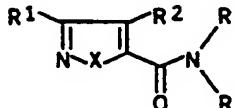


15

wobei wiederum R^8 und R^9 vorzugsweise für C_1 - C_4 -Alkyl stehen.

Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel

20



(1).

25

In der X, R¹, R², R³ und R⁴ die für Formel Ia angegebenen Bedeutungen haben, mit der Maßgabe, daß X Schwefel ist, wenn R¹ CH₃, R² COOH oder COOC₂H₅ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten, und daß X Sauerstoff ist, wenn R¹ Wasserstoff, R² COOH oder CONH₂ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten, sind neu.

Die Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel I bzw. Ia können auf folgenden Wegen hergestellt werden:

35 1. Ein Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel Ib und Ia, in der R^2 COOR^5 und R^5 Wasserstoff oder $C_1\text{-C}_8\text{-Alkyl}$ bedeuten (vgl. Schema 1), beruht auf der Umsetzung eines Isoxazol- oder Isothiazol-4,5-dicarbonsäuredialkylesters II ($R^8 = C_1\text{-C}_8\text{-Alkyl}$) mit wässriger Base und anschließende Umsetzung mit Mineralsäure zu einer Carbonsäure III. Als Dicarbonsäureester II kommen insbesondere Niedrigalkylester ($R^5 = R^8 = C_1\text{-C}_4\text{-Alkyl}$) in Betracht, wobei Dimethylester und Diethylester besonders bevorzugt sind.

Die Reaktion wird so durchgeführt, daß man einen Dicarbonsäuredialkylester II bei Temperaturen zwischen etwa 0 und 80 °C, vorzugsweise zwischen 0 und 50 °C, in einem organischen Lösungsmittel, z.B. Methanol oder Ethanol, mit einer starken Base, z.B. NaOH, KOH oder Ca(OH)₂, behandelt. Im allgemeinen wird dabei etwa 1 Äquivalent der starken Base in wässriger Lösung eingesetzt. Nach erfolgter Umsetzung wird abgekühlt und mit einer starken Mineralsäure, z.B. Salzsäure oder Schwefelsäure, angesäuert. Die entstehende Carbonsäure III kann auf übliche Art und Weise z.B. durch Absaugen oder durch Extraktion mit einem organischen Lösungsmittel isoliert werden.

45 Zur Überführung der Carbonsäure III in das Carbonsäurehalogenid IV bringt man die Säure III in üblicher Art und Weise mit einem anorganischen Säurehalogenid, wie Thionylchlorid, Phosphortri- oder Phosphorpentahalogeniden, zur Reaktion, wobei die Chloride bevorzugt sind. Dabei wird zweckmäßigerweise das anorganische Säurehalogenid in 1 bis 5 Moläquivalenten, vorzugsweise 1 bis 2 Moläquivalenten, eingesetzt. Man kann ohne Lösungsmittel oder in Gegenwart eines inerten organischen Lösungsmittels wie z.B. Benzol oder Toluol bei Temperaturen zwischen Raumtemperatur und der Siedetemperatur des anorganischen Säurehalogenids bzw. des inerten organischen Lösungsmittels arbeiten. In manchen Fällen kann der Zusatz eines Katalysators, wie Dimethylformamid oder 4-Dimethylaminopyridin, von Vorteil sein. Nach Beendigung der Reaktion kann das Säurehalogenids IV auf übliche Art und Weise isoliert werden, z.B. durch Abdestillation des Überschusses an anorganischem Säurehalogenid und des organischen Lösungsmittels und nachfolgende Destillation des Säurechlorids IV bei Normaldruck oder vermindertem Druck.

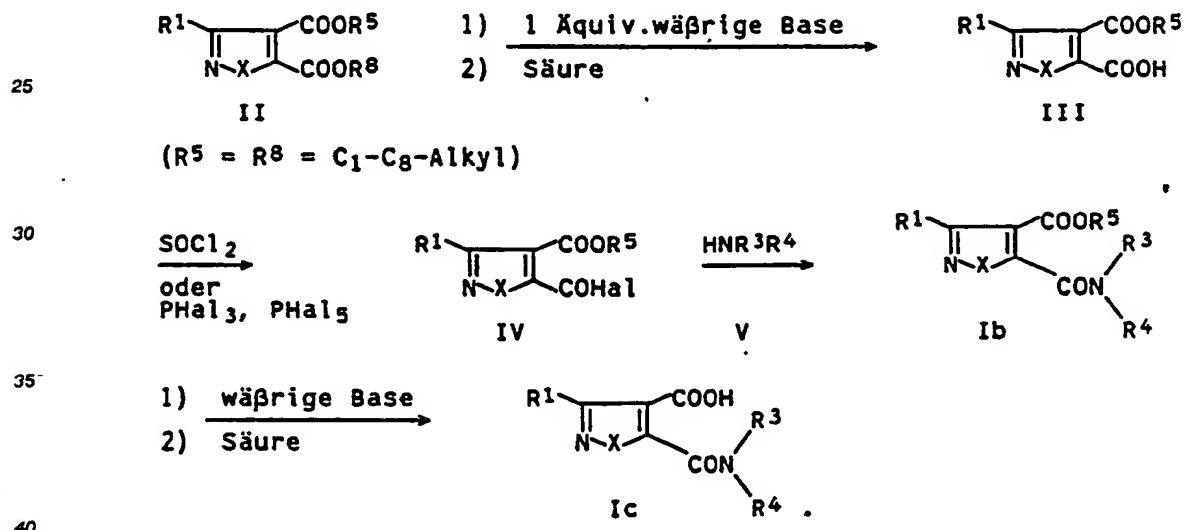
55 Die Carbonsäureamide I b erhält man aus den Carbonsäurehalogeniden durch Umsetzung mit einem Amin V. Dabei geht man zweckmäßigerweise so vor, daß man das Carbonsäurehalogenid in einem Inerten organischen Lösungsmittel wie Dichlorethan, oder einem Ether wie Diethylether oder Methyl-tert.-butylether mit einem Amin V, ebenfalls gelöst in einem organischen Lösungsmittel, zur Reaktion bringt. Dabei setzt

man das Amin V zweckmäßigerverweise in 2- bis 5-fach molarer Menge, vorzugsweise 2- bis 3-fach molarer Menge ein, um den entstehenden Halogenwasserstoff zu binden. Man kann auch in Gegenwart einer Hilfsbase wie einem tertiären Amin, z.B. Triethylamin, arbeiten. In diesem Fall genügen 1 bis 1,5 Moläquivalente Amin V. Die Reaktionstemperatur kann zwischen 0 und 50 °C, vorzugsweise zwischen 0 und 20 °C betragen. Die Reaktion ist im allgemeinen nach 1 bis 12 Stunden beendet. Das Gemisch kann wie üblich aufgearbeitet werden, beispielsweise durch Hydrolyse mit Wasser und Extraktion des Produktes der Formel Ib mit einem organischen Lösungsmittel und Einengen des organischen Lösungsmittels. Zur Reinigung kann das Produkt der Formel Ib beispielsweise umkristallisiert oder chromatographiert werden.

Aus den 4-Alkoxy carbonyl-isoxazol-5-carbonsäureamiden bzw. 4-Alkoxy carbonyl-isothiazol-5-carbonsäureamiden Ib lassen sich die freien Carbonsäuren Ic durch Umsetzung mit wäßrigen Basen und anschließender Umsetzung mit Mineralsäuren erhalten. Die Reaktion wird so durchgeführt, daß man den Ester Ib bei Temperaturen zwischen 0 und 80 °C, vorzugsweise zwischen 0 und 50 °C, in einem organischen Lösungsmittel wie z.B. Methanol oder Ethanol mit einer Base wie z.B. NaOH, KOH oder Ca(OH)₂ behandelt. Im allgemeinen werden dabei etwa 1 bis 3 Äquivalente, vorzugsweise 1 bis 1,5 Äquivalente der starken Base in wäßriger Lösung eingesetzt. Nach erfolgter Umsetzung wird unter Kühlung mit einer starken Mineralsäure, z.B. Salzsäure oder Schwefelsäure, angesäuert. Die entstehenden Carbonsäuren Ic können durch Absaugen oder durch Extraktion mit einem organischen Lösungsmittel und Einengen dieses organischen Lösungsmittels isoliert werden. Zur weiteren Reinigung der Säuren Ic können diese umkristallisiert oder chromatographiert werden.

20

Schema 1:



Die für dieses Verfahren als Ausgangsmaterial benötigten Isoxazol- und Isothiazol-4,5-dicarbonsäurealkylester II sind literaturbekannt (J. Org. Chem. 43, 3736 (1978); Chem. Pharm. Bull. 28, 3298 (1980); Tetrahedron 30, 1365 (1974)) oder können nach allgemein literaturbekannten Methoden hergestellt werden.

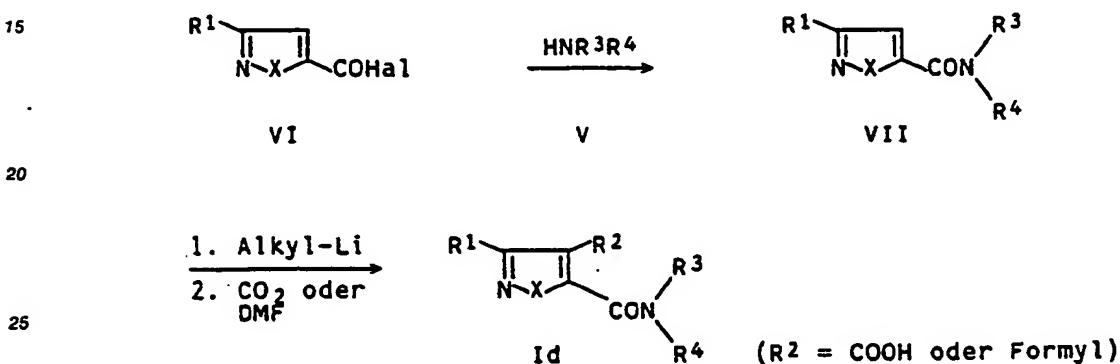
45 2. Ein weiteres Verfahren zur Herstellung der Verbindungen Id beruht auf der Umsetzung eines Isoxazol- bzw. Isothiazol-5-carbonsäurehalogenids VI mit einem Amin V. Als Carbonsäurehalogenide VI sind die Chloride bevorzugt. Dabei geht man zweckmäßigerverweise so vor, daß man das Carbonsäurehalogenid in einem inerten organischen Lösungsmittel wie Dichlormethan, oder einem Ether wie Diethylether oder Methyl-tert.butylether mit einem Amin V, ebenfalls gelöst in einem organischen Lösungsmittel, zur Reaktion bringt. Dabei setzt man das Amin V zweckmäßigerverweise in 2- bis 5-fach molarer Menge, vorzugsweise 2- bis 3-fach molarer Menge, ein, um den entstehenden Halogenwasserstoff zu binden. Man kann auch in Gegenwart einer Hilfsbase wie z.B. einem tertiären Amin (Triethylamin) arbeiten. In diesem Fall genügen 1 bis 1,5 Moläquivalente Amin V. Die Reaktionstemperatur kann zwischen 0 und 50 °C, vorzugsweise zwischen 0 und 20 °C betragen. Die Reaktion ist im allgemeinen nach 1 bis 12 Stunden beendet. Das Gemisch kann wie üblich aufgearbeitet werden, beispielsweise durch Hydrolyse mit Wasser und Extraktion des Produktes VII mit einem organischen Lösungsmittel und Einengen des organischen Lösungsmittels.

55 Aus den Isoxazol- bzw. Isothiazolamiden VII erhält man die 5-Aminocarbonyl-Isoxazol-4-carbonsäuren bzw. 5-Aminocarbonyl-Isothiazol-4-carbonsäuren der Formel Id, durch Umsetzung mit Alkylolithium, vorzugs-

weise unter Zugabe eines unter den Reaktionsbedingungen inerten Lösungsmittels, wie Diethylether oder Tetrahydrofuran. In der Regel arbeitet man unter einer Stickstoffatmosphäre bei Temperaturen zwischen -70 und -80 °C. Die Alkyllithiumverbindung wird bei diesem Verfahren im allgemeinen in 2 -3-fach molarer Menge bezogen auf eingesetztes Amid der Formel VII verwendet. Nach vollständiger Umsetzung wird das Gemisch mit Kohlendioxid behandelt, vorzugsweise in einem inerten Lösungsmittel wie Diethylether oder z.B. Tetrahydrofuran, wobei man die gewünschten Produkte der Formel Id, in der R² Carboxyl bedeutet, erhält.

Nach dem gleichen Verfahren können auch Isoxazol- und Isothiazolamide der Formel Id, bei denen R² für Formyl steht, erhalten werden, wenn anstelle des Kohlendioxids Dimethylformamid eingesetzt wird. Man erhält nach üblicher Aufarbeitung substituierte 4-Formyl-isoxazol-5-carbonamide bzw. 4-Formyl-isothiazol-5-carbonamide der Formel Id.

Schema 2:

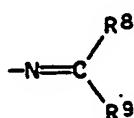


30 Die für dieses Verfahren als Ausgangsmaterial benötigten Isoxazol- und Isothiazol-5-carbonsäurehalogenide VI sind literaturbekannt oder können aus den entsprechenden Carbonsäuren VIII auf übliche Art und Weise, wie bereits oben beschrieben, hergestellt werden.



40 Die hierfür benötigten Carbonsäuren VIII sind ebenfalls literaturbekannt (Chemische Berichte 106, 3345 (1973), J. Chem. Soc. 1959, 3061, J. Chem. Soc. 1963, 2032; Adv. in Heterocyclic Chem. 14, 1 (1972)) oder können nach allgemein literaturbekannten Methoden, z.B. aus den entsprechenden Alkoholen oder Aldehyden durch Oxidation oder den entsprechenden Nitrilen durch Hydrolyse hergestellt werden.

3. Ein weiteres Verfahren führt zu Verbindungen Ie, in der R^2 $COOR^5$ und R^5 gegebenenfalls durch C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Alkoxy- C_1 - C_4 -alkoxy, Halogen, C_1 - C_4 -Alkylthio, C_1 - C_4 -Alkylsulfinyl, C_1 - C_4 -Alkylsulfonyl, C_1 - C_4 -Alkoxy carbonyl, Benzylxy, oder durch Phenyl, das durch C_1 - C_4 -Alkyl, C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Halogen, C_1 - C_4 -Alkoxy carbonyl, Benzylxy, oder durch Phenyl, das durch C_1 - C_4 -Alkyl, C_1 - C_4 -Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C_1 - C_8 -Alkyl, C_3 - C_8 -Cycloalkyl, gegebenenfalls durch Phenyl, das durch C_1 - C_4 -Alkyl, C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C_3 - C_8 -Alkenyl, C_3 - C_8 -Alkinyl, C_6 - C_7 -Cycloalkanimino, Succinimido oder einen Rest der Formel



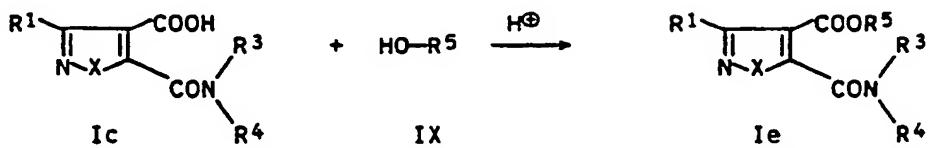
bedeuten, durch Umsetzung einer Säure Ic mit einem entsprechenden Alkohol IX in Gegenwart einer basischen Verbindung. Die Reaktionen zwischen 0 und 100°C.

vorzugsweise zwischen 20 und 50 °C. In der Regel wird der Alkohol IX im Überschuß eingesetzt, es kann aber auch ein inertes Lösungsmittel verwendet werden.

Schema 3:

5

10



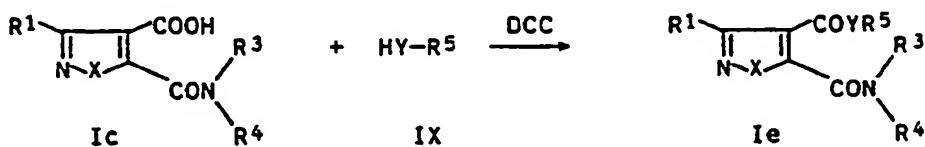
4. Ein weiteres Verfahren zur Herstellung der Verbindungen der Formel Ie besteht in der Umsetzung einer Säure Ic mit einem Alkohol oder Thiol IX in Gegenwart eines wasserentziehenden Mittels (z.B. Dicyclohexylcarbodiimid (DCC)) bei einer Temperatur zwischen -20 und 50 °C, vorzugsweise zwischen 0 und 30 °C. In der Regel werden die Ausgangsmaterialien in etwa stöchiometrischer Menge zur Reaktion gebracht. Die Reaktion wird vorzugsweise in Gegenwart eines inerten Lösungsmittels, z.B. Tetrahydrofuran, Dichlormethan oder Toluol, durchgeführt.

15

Schema 4:

20

25



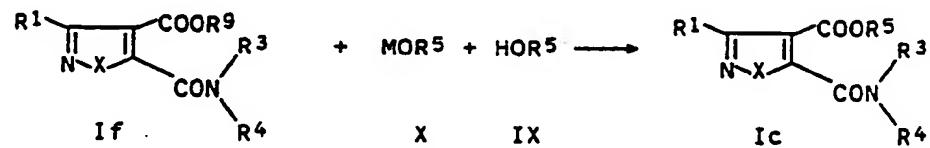
(mit Y = O oder S).

5. Ein weiteres Verfahren zur Herstellung der Verbindungen Ic beruht auf der Umsetzung eines Carbonsäurealkylesters If mit einem Alkalimetallalkoxid X, wie Natrium- oder Kaliumalkoxid, mit einem entsprechenden Alkohol IX in an sich bekannter Art und Weise bei Temperaturen zwischen 20 °C und der Siedetemperatur des gewählten Alkohols IX.

35

Schema 5:

40



(R9 = Methyl oder Ethyl)

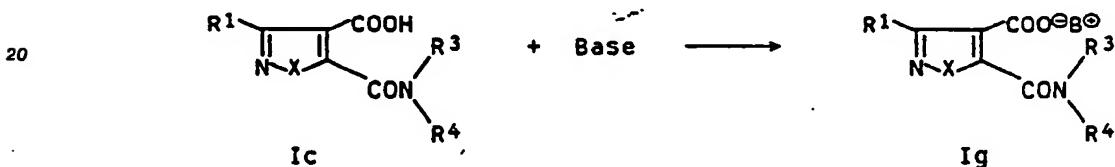
45 6. Verbindungen der Formel Ig, in der R² für COOR⁵ steht, wobei R⁵ ein salzbildendes Kation wie z.B. Alkalimetall, Erdalkalimetall, Ammonium oder substituiertes Ammonium bedeutet, werden durch Umsetzung einer substituierten Isoxazol- oder Isothiazol-4-carbonsäure Ic mit einem Äquivalent des salzbildenden Kations erhalten. Handelt es sich dabei um ein anorganisches Kation wie z.B. Natrium, Kalium oder Calcium, löst bzw. suspendiert man zweckmäßigerweise die Säure Ic in Wasser oder einem niederen Alkohol oder einer Mischung derselben und gibt ein Äquivalent des salzbildenden Kations zu. Das salzbildende Kation kann z.B. in Form seines Hydroxids, Carbonats oder Bicarbonats, vorzugsweise in Form seines Hydroxids, eingesetzt werden. Die Reaktion ist im allgemeinen nach wenigen Minuten beendet und kann wie üblich z.B. durch Ausfällen und Absaugen oder durch Einengen der Lösung aufgearbeitet werden. Zur Herstellung von Verbindungen Ig, bei denen B⁶ für Ammonium oder organisches Ammonium steht, löst 50 bzw. suspendiert man die Säure Ic in einem organischen Lösungsmittel, wie z.B. Diethylether, Tetrahydrofuran oder Dioxan, und behandelt die Mischung mit einem Äquivalent Ammoniak, einem Amin oder einem Tetraalkylammoniumhydroxid.

55 Unter den Aminen, welche eingesetzt werden können, sollen die folgenden erwähnt werden: Methyla-

min, Ethylamin, n-Propylamin, Isopropylamin, n-Butylamin, Isobutylamin, sek.-Butylamin, n-Amylamin, Isoamylamin, Hexylamin, Heptylamin, Octylamin, Nonylamin, Decylamin, Undecylamin, Dodecylamin, Tridecylamin, Tetradecylamin, Pentadecylamin, Hexadecylamin, Heptadecylamin, Octadecylamin, Methylethylamin, Methylisopropylamin, Methylhexylamin, Methylnonylamin, Methylpentadecylamin, Methyloctadecylamin, 5 Ethylbutylamin, Ethylheptylamin, Ethyloctylamin, Hexylheptylamin, Hexyloctylamin, Dimethylamin, Diethylamin, Di-n-propylamin, Diisopropylamin, Di-n-amylamin, Diisoamylamin, Dihexylamin, Diheptylamin, DiOctylamin, Trimethylamin, Triethylamin, Tri-n-propylamin, Triisopropylamin, Tri-n-butylamin, Trisobutylamin, Tri-sek.-butylamin, Tri-n-amylamin, Ethanolamin, n-Propanolamin, Isopropanolamin, Diethanolamin, N,N-Diethylethanolamin, N-Ethylpropanolamin, N-Butylethanolamin, Allylamin, n-Butenyl-2-amin, n-Pentenyl-2-amin, 10 2,3-Dimethylbutenyl-2-amin, Di-butenyl-2-amin, n-Hexenyl-2-amin, Propylenediamin, Talgarmin, Cyclopentylamin, Cyclohexylamin, Dicyclohexylamin, Piperidin, Morpholin und Pyrrolidin.

Bei den Tetraalkylammoniumhydroxiden können z.B. Tetramethyl-, Tetraethyl- oder Trimethylbenzylammoniumhydroxid eingesetzt werden. In der Regel fällt das Ammoniumsalz oder organische Ammoniumsalz aus der Lösung aus und kann nach üblichen Methoden isoliert werden. Alternativ kann das Salz der Formel 15 Ig auch durch Einengen des Lösungsmittels erhalten werden.

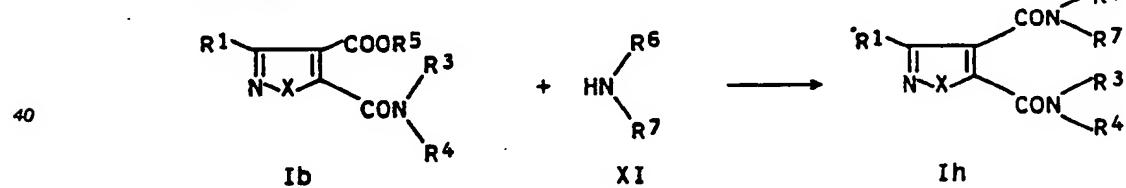
Schema 6:



26

7. Ein anderes Verfahren führt zu Verbindungen **Ih**, in der $\text{R}^2\text{CONR}^6\text{R}^7$ bedeutet. Es besteht in der Umsetzung eines Esters **Ib** mit einem primären oder sekundären Amin **XI**. Das Verfahren wird so durchgeführt, daß man einen Ester **Ib** mit der 1- bis 50-fach molaren Menge Amin **XI**, gegebenenfalls in einem organischen Lösungsmittel, bei Temperaturen zwischen Raumtemperatur und der Siedetemperatur des Amins oder des organischen Lösungsmittels umsetzt. Als Ester **Ib** sind Niederalkylester, besonders die Methyl- und Ethylester bevorzugt. Die Reaktionsprodukte **Ih** können auf übliche Art und Weise, wie z.B. durch Absaugen oder Einengen der Lösung isoliert werden und gegebenenfalls durch Umkristallisation oder Chromatographie weiter gereinigt werden.

35 Schema 7:



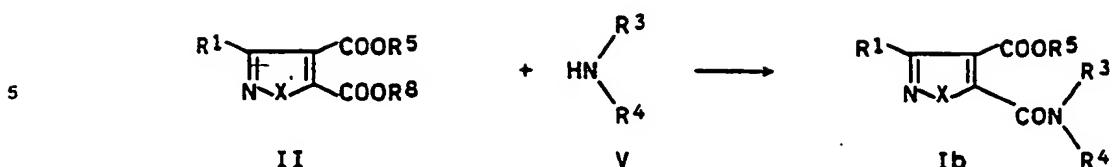
45

8. Ein weiteres Verfahren zur Synthese der Verbindungen **Ib** besteht in der Umsetzung eines Isoxazol- oder Isothiazol-4,5-dicarbonsäuredialkylesters **II** mit einem Amin **V**.

Als Dialkylester **II** kommen insbesondere Niedrigalkylester, vorzugsweise Dimethylester oder Diethylester, in Betracht. Die Reaktion wird so durchgeführt, daß man einen Dicarbonsäuredialkylester **II** bei Temperaturen zwischen 0 und 100 °C, vorzugsweise zwischen 50 und 80 °C in einem organischen Lösungsmittel wie z.B. einem Alkohol wie etwa Methanol oder Ethanol mit ungefähr einem Äquivalent eines primären oder sekundären Amins **V** behandelt. Nach erfolgter Umsetzung wird abgekühlt und abgesaugt oder eingeeengt. Das erhaltene Produkt der Formel **Ib** kann mit üblichen Standardmethoden, wie Umkristallisation oder Chromatographie, weiter gereinigt werden.

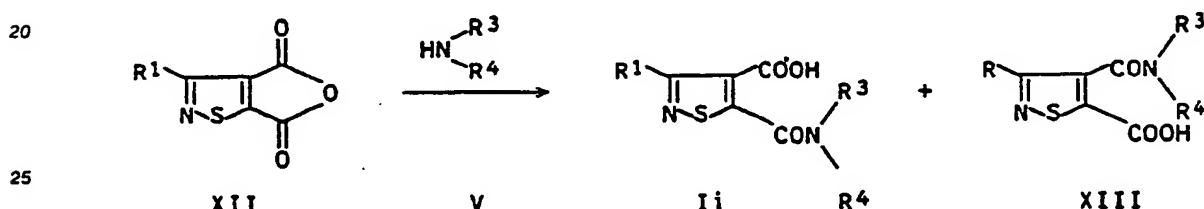
55

Schema 8:



10 9. Verbindungen der Formel II können durch Umsetzung eines substituierten Isothiazol-4,5-dicarbonsäureanhydrids XII mit einem Amin V erhalten werden. Die Reaktion wird zweckmäßigerweise so durchgeführt, daß man das Anhydrid XII in einem inerten Lösungsmittel, wie einem Ether oder halogenierten Kohlenwasserstoff, vorlegt und etwa molare Mengen eines Amins V, gegebenenfalls ebenfalls gelöst in einem inerten Lösungsmittel, zutropft. Nach beendeter Reaktion wird das Reaktionsprodukt abgesaugt oder durch Eindringen des verwendeten Lösungsmittels isoliert. In manchen Fällen können bei diesem Verfahren die isomeren Amide XIII entstehen, wobei im allgemeinen die Amide II die bevorzugten sind.

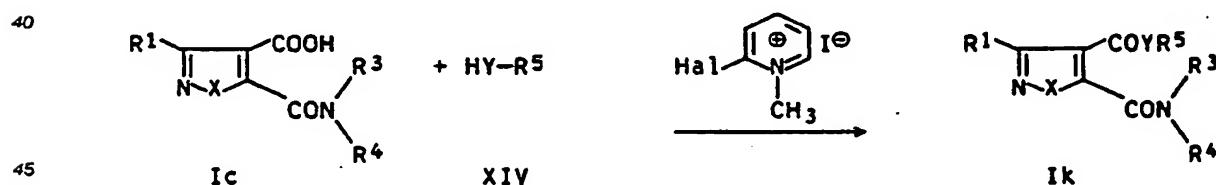
Schema 9:



Die für dieses Verfahren als Ausgangsmaterial benötigten Isothiazol-4,5-dicarbonsäureanhydride XIII sind literaturbekannt (J. Chem. Soc. 1959, 3061) oder können nach allgemein literaturbekannten Methoden synthetisiert werden.

35 10. Ein weiteres Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel I_k besteht in der Umsetzung einer Säure I_c mit einem Alkohol bzw. Thiol XIV in Anwesenheit von 1-Methyl-2-halogenpyridiniumiodiden bei einer Temperatur zwischen 20 und 80 °C, vorzugsweise zwischen 30 und 40 °C. Die Reaktion wird in Gegenwart eines inerten Lösungsmittels, z.B. Dichlormethan oder Toluol, durchgeführt. Das Verfahren ist im Prinzip literaturbekannt (Chern. Lett., 1045 (1975); Ibid., 13 (1976); Ibid., 49/1976)).

Schema 10:

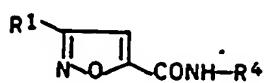


Die folgenden Beispiele erläutern die Herstellung der Vorprodukte für die Synthese der Verbindungen I bzw. Ia:

Beispiel a

55 Zu 10,0 g 3-Ethyl-isoxazol-5-carbonsäurechlorid in 150 ml Dichlormethan werden unter Eiskühlung 11,7 g Anilin zugetropft. Man führt über Nacht bei Raumtemperatur nach, versetzt mit Wasser und konz. Salzsäure und trennt die organische Phase ab. Nach Waschen der organischen Phase mit Natriumbicarbonatlösung und Einengen erhält man 11,8 g 3-Ethyl-isoxazol-5-carbonsäureanilid als farblose Kristalle vom Fp. 122-124 °C.

Auf analoge Weise können beispielsweise die Isoxazol-5-carbonsäureamide VII synthetisiert werden:

| 5 |  | (VII) | |
|----|---|--|----------------|
| | <u>R¹</u> | <u>R⁴</u> | <u>Fp [°C]</u> |
| 10 | H | i-C ₃ H ₇ | |
| | H | tert.-C ₄ H ₉ | 103-106 |
| | H | cyclo-C ₃ H ₅ | |
| | H | cyclo-C ₆ H ₁₁ | |
| 15 | H | C ₆ H ₅ | |
| | CH ₃ | H | 167-171 |
| | CH ₃ | i-C ₃ H ₇ | 92- 93 |
| | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 55- 60 |
| 20 | CH ₃ | 1-Ethylcyclohexyl | ö1 |
| | CH ₃ | 4-Methyl-tetrahydro- | 63- 65 |
| | | pyran-4-yl | |
| | CH ₃ | C ₆ H ₅ | 145-147 |
| 25 | CH ₃ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 216-219 |
| | CH ₃ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 146-148 |
| | C ₂ H ₅ | i-C ₃ H ₇ | 85- 87 |
| | C ₂ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | 67- 70 |
| 30 | C ₂ H ₅ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 170-173 |
| | C ₂ H ₅ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 121-122 |
| | i-C ₃ H ₇ | H | |
| | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | 69- 73 |
| 35 | i-C ₃ H ₇ | C ₂ H ₅ | 69- 72 |
| | i-C ₃ H ₇ | n-C ₃ H ₇ | 79- 80 |
| | i-C ₃ H ₇ | i-C ₃ H ₇ | 122-125 |
| | i-C ₃ H ₇ | n-C ₄ H ₉ | 67- 68 |
| 40 | i-C ₃ H ₇ | sec.-C ₄ H ₉ | 133-135 |
| | i-C ₃ H ₇ | i-C ₄ H ₉ | 85- 86 |
| | i-C ₃ H ₇ | tert.-C ₄ H ₉ | 116-118 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ C ₂ H ₅ | 118-120 |
| 45 | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ C ₃ H ₇ | 33- 34 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃ | 65- 66 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ SCH ₃ | 42 |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ CH ₂ SCH ₃ | |
| 50 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ SCH ₃ | 34- 36 |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ CH ₂ OCH ₃ | ö1 |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂ | ö1 |
| | i-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₃ H ₅ | 88- 90 |
| 55 | i-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | 152-154 |

| | R1 | R4 | Fp [°C] |
|----|--------------------------------------|--|---------|
| 5 | i-C ₃ H ₇ | 1-Methyl-cyclohexyl | |
| | i-C ₃ H ₇ | 1-Ethylcyclohexyl | 50- 51 |
| | i-C ₃ H ₇ | 4-Methyl-tetrahydro- | 94- 96 |
| | | pyran-4-yl | |
| | i-C ₃ H ₇ | 4-Ethyl-tetrahydro- | 50- 51 |
| 10 | i-C ₃ H ₇ | pyran-4-yl | |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ -cycloC ₆ H ₁₁ | 83 |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ CH=CH ₂ | 65- 66 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ CH=CH ₂ | 99-106 |
| 15 | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ C≡CH | 85- 86 |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -C ₆ H ₅ | 79- 81 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ C ₆ H ₅ | |
| | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -C(CH ₃) ₃ | 87- 89 |
| 20 | i-C ₃ H ₇ | -C ₆ H ₅ | 106-108 |
| | i-C ₃ H ₇ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 176-178 |
| | i-C ₃ H ₇ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 74- 78 |
| | tert.-C ₄ H ₉ | i-C ₃ H ₇ | 120-122 |
| | tert.-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | 129-133 |
| 25 | tert.-C ₄ H ₉ | C ₆ H ₅ | 121-122 |
| | tert.-C ₄ H ₉ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 158-161 |
| | tert.-C ₄ H ₉ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 104-108 |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | i-C ₃ H ₇ | 139-140 |
| 30 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | tert.-C ₄ H ₉ | 121-122 |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | cyclo-C ₃ H ₅ | 144-146 |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | C ₆ H ₅ | 180-181 |
| 35 | Tetrahydropyran-3-yl | i-C ₃ H ₇ | 102-104 |
| | Tetrahydropyran-3-yl | tert.-C ₄ H ₉ | 110-114 |
| | Tetrahydropyran-3-yl | cyclo-C ₃ H ₅ | 108-110 |
| | Tetrahydropyran-3-yl | cyclo-C ₆ H ₁₁ | |
| 40 | Tetrahydropyran-3-yl | C ₆ H ₅ | 149-151 |
| | C ₆ H ₅ | i-C ₃ H ₇ | |
| | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | C ₆ H ₅ | cyclo-C ₃ H ₅ | |
| 45 | C ₆ H ₅ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | |
| | C ₆ H ₅ | C ₆ H ₅ | |
| | 4-Cl-C ₆ H ₄ | i-C ₃ H ₇ | 166-171 |
| | 4-Cl-C ₆ H ₄ | tert.-C ₄ H ₉ | 128-132 |
| 50 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | C ₆ H ₅ | 229-232 |
| | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | |
| | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 163-165 |
| | cyclo-C ₃ H ₅ | i-C ₃ H ₇ | 114-117 |
| 55 | cyclo-C ₃ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | 106-107 |
| | cyclo-C ₃ H ₅ | C ₆ H ₅ | 180-186 |

| | R ¹ | R ⁴ | F _p [°C]/ ¹ H.NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|-------------------------------------|---|---|
| 5 | i-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₅ H ₉ | 119-121 |
| | i-C ₃ H ₇ | Tetrahydrofuran-3-yl | 75- 78 |
| | i-C ₃ H ₇ | Thiazol-2-yl | 165-168 |
| | i-C ₃ H ₇ | 5-Methyl-thiazol-2-yl | 149-153 |
| | i-C ₃ H ₇ | 5-Ethyl-thiazol-2-yl | 157-163 |
| 10 | i-C ₃ H ₇ | 5-n-Propyl-thiazol-2-yl | 140-145 |
| | i-C ₃ H ₇ | CH(CH ₃)CH ₂ CN | 88- 92 |
| | i-C ₃ H ₇ | -C(CH ₃) ₂ -CH ₂ CN | 95- 97 |
| | i-C ₃ H ₇ | OC ₂ H ₅ | 33- 35 |
| 15 | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-2-yl | 104-106 |
| | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-3-yl | 150-152 |
| | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-4-yl | 185-187 |
| | i-C ₃ H ₇ | Pyrimid-2-yl | 94- 99 |
| 20 | n-C ₃ H ₇ | i-C ₃ H ₇ | 108-110 |
| | n-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₃ H ₅ | 104-106 |
| | n-C ₃ H ₇ | tert.-C ₄ H ₉ | 85- 86 |
| | n-C ₃ H ₇ | C ₆ H ₅ | 118-119 |
| 25 | n-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | 136-137 |
| | s-C ₄ H ₉ | i-C ₃ H ₇ | 150-152 |
| | s-C ₄ H ₉ | cyclo-C ₃ H ₅ | 107-111 |
| | s-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | 138-142 |
| 30 | s-C ₄ H ₉ | C ₆ H ₅ | 99-101 |
| | i-C ₃ H ₇ | N(CH ₃) ₂ | 131-133 |
| | CH ₃ | N(CH ₃) ₂ | 111-113 |
| | CH ₃ | Morpholino | 190-192 |
| 35 | CH ₃ | Piperidino | 158-161 |
| | CH ₃ | CH ₃ | 146-148 |
| | i-C ₃ H ₇ | Piperidino | 133-135 |
| | i-C ₃ H ₇ | Morpholino | 178-179 |
| 40 | CH ₃ | C ₂ H ₅ | 97- 99 |
| | neo-C ₅ H ₁₁ | CH ₃ | 128-130 |
| | neo-C ₅ H ₁₁ | i-C ₃ H ₇ | 85- 88 |
| | neo-C ₅ H ₁₁ | cyclo-C ₃ H ₅ | 109-112 |
| 45 | neo-C ₅ H ₁₁ | tert.-C ₄ H ₉ | 97- 99 |
| | neo-C ₅ H ₁₁ | C ₆ H ₅ | 137-140 |
| | n-C ₄ H ₉ | CH ₃ | 74- 76 |
| | n-C ₄ H ₉ | i-C ₃ H ₇ | 97-100 |
| 50 | n-C ₄ H ₉ | cyclo-C ₃ H ₅ | 82- 86 |
| | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | 60-64 |
| | n-C ₄ H ₉ | C ₆ H ₅ | 118-120 |
| | cyclo-C ₅ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | 114-115 |
| 55 | cyclo-C ₅ H ₉ | CH ₃ | 88- 89 |

| | R ¹ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H.NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|---|---|---|
| 5 | | | |
| | cyclo-C ₅ H ₉ | cyclo-C ₃ H ₅ | 108-109 |
| | cyclo-C ₅ H ₉ | C ₆ H ₅ | 146-148 |
| | n-C ₄ H ₉ | OCH ₃ | 62- 66 |
| 10 | CH ₃ -O-CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 50- 55 |
| | CH ₃ -O-CH ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | 55- 60 |
| | 2-Methoxyphenyl | tert.-C ₄ H ₉ | 119-120 |
| | 2-Methoxyphenyl | cyclo-C ₃ H ₅ | 160-163 |
| 15 | i-C ₃ H ₇ | CH ₂ -cyclo-C ₃ H ₅ | 77- 80 |
| | n-C ₄ H ₉ | -CH ₂ -cyclo-C ₃ H ₅ | 102-105 |
| | CH ₃ O-CH(CH ₃)- | tert.-C ₄ H ₉ | 76- 79 |
| | cyclo-C ₃ H ₅ | cyclo-C ₅ H ₉ | 148-149 |
| 20 | 2,6-Difluorphenyl | tert.-C ₄ H ₉ | 118-122 |
| | 2,6-Difluorphenyl | cyclo-C ₃ H ₅ | 128-132 |
| | CH ₃ | cyclo-C ₄ H ₇ | 114-115 |
| | i-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₄ H ₇ | 84- 85 |
| 25 | CH ₃ O | tert.-C ₄ H ₉ | 65- 68 |



| | R ¹ | R ³ | R ⁴ | Fp [°C] |
|--|---------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|---------|
| | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | CH ₃ | |
| | i-C ₃ H ₇ | C ₂ H ₅ | C ₂ H ₅ | 81 |

40

Beispiel b

45 Zu 18,9 g Kaliumhydroxid in 100 ml Wasser werden bei Raumtemperatur 65 g 3-Methyl-Isoxazol-4,5-dicarbonsäurediethylester gelöst in 100 ml Ethanol zugetropft. Nach 16 Stunden wird auf 300 ml Wasser gegossen, mit Ether extrahiert und die wäßrige Phase mit konz. Salzsäure eingesäuert. Man extrahiert mit Dichlormethan und erhält nach dem Einengen 3-Methyl-4-ethoxycarbonyl-isoxazol-5-carbonsäure als farblose Kristalle vom Fp. 54-58 °C.

50

Beispiel c

55 Zu 85,5 g 3-Ethyl-Isothiazol-4,5-dicarbonsäuredimethylester in 300 ml Methanol wird unter Eiskühlung eine Lösung aus 14,9 g NaOH in 120 ml Wasser und 150 ml Methanol zugetropft. Nach 2 Stunden wird eingeeengt, zum Rückstand 1,5 l Wasser zugegeben, nachgerührt und mit Ether extrahiert. Die wäßrige Phase säuert man mit konz. Salzsäure an und schüttelt mit Dichlormethan aus. Einengen der organischen Phasen liefert 76,4 g 3-Ethyl-4-methoxycarbonyl-isothiazol-5-carbonsäure vom Fp. 43-45 °C.

Analog Beispielen b und c können beispielsweise die Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäuren III synthetisiert werden:



| 10 | R1 | R5 | X | Fp [°C] |
|----|------------|------|---|---------|
| | H | CH3 | O | |
| | H | C2H5 | O | |
| 15 | H | CH3 | S | |
| | H | C2H5 | S | |
| | CH3 | CH3 | O | |
| | CH3 | CH3 | S | 75- 81 |
| 20 | CH3 | C2H5 | S | |
| | C2H5 | CH3 | O | |
| | C2H5 | C2H5 | O | |
| | C2H5 | C2H5 | S | |
| 25 | n-C3H7 | CH3 | O | |
| | n-C3H7 | C2H5 | O | |
| | n-C3H7 | CH3 | S | |
| | n-C3H7 | C2H5 | S | |
| 30 | i-C3H7 | CH3 | O | |
| | i-C3H7 | C2H5 | O | |
| | i-C3H7 | CH3 | S | 61 |
| | i-C3H7 | C2H5 | S | |
| 35 | s-C4H9 | CH3 | O | |
| | s-C4H9 | C2H5 | O | |
| | s-C4H9 | CH3 | S | |
| | s-C4H9 | C2H5 | S | |
| 40 | tert.-C4H9 | CH3 | O | |
| | tert.-C4H9 | C2H5 | O | |
| | tert.-C4H9 | CH3 | S | |
| | tert.-C4H9 | C2H5 | S | |

45

50

55

| | R1 | R5 | X | Fp [°C] |
|----|--------------------------------------|-------------------------------|---|---------|
| | cyclo-C ₃ H ₅ | CH ₃ | O | |
| | cyclo-C ₃ H ₅ | C ₂ H ₅ | O | |
| 5 | cyclo-C ₃ H ₅ | CH ₃ | S | |
| | cyclo-C ₃ H ₅ | C ₂ H ₅ | S | |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | CH ₃ | O | |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | C ₂ H ₅ | O | |
| 10 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | CH ₃ | S | |
| | cyclo-C ₆ H ₁₁ | C ₂ H ₅ | S | |
| | Tetrahydropyran-3-yl | CH ₃ | O | |
| 15 | Tetrahydropyran-3-yl | C ₂ H ₅ | O | |
| | Tetrahydropyran-3-yl | CH ₃ | S | |
| 20 | Tetrahydropyran-3-yl | C ₂ H ₅ | S | |
| | C ₆ H ₅ | CH ₃ | O | |
| | C ₆ H ₅ | C ₂ H ₅ | O | |
| 25 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | S | 139-141 |
| | C ₆ H ₅ | C ₂ H ₅ | S | |

30

Herstellungsbeispiele für Verbindungen I bzw. Ia

35

Beispiel 1

35

Zu 10 g 3-Methyl-isoxazol-4,5-dicarbonsäurediethylester gelöst in 100 ml Methanol werden 2,9 g Isopropylamin zugetropft und anschließend zum Rückfluß erhitzt. Nach 7 Stunden wird eingeeengt und das verbleibende Öl an Kieselgel chromatographiert (Toluol : Aceton = 9 : 1). Man erhält 5-isopropylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazol-carbonsäuremethylester als farblose Kristalle vom Fp. 64-66 °C (Verbindung Nr. 1005)

40

Beispiel 2

45

2,6 g Ester aus Beispiel 1 und 0,8 g Kaliumhydroxid werden in 20 ml Wasser und 20 ml Ethanol 16 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Anschließend wird mit Wasser verdünnt, mit konz. Salzsäure angesäuert und mit Dichlormethan ausgeschüttelt. Nach dem Einengen erhält man 1,8 g 5-isopropylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäure, farblose Kristalle vom Fp. 86-92 °C (Verbindung Nr. 1004)

50

Beispiel 3

55

Zu 9,0 g Anilid aus Beispiel a, gelöst in 200 ml absolutem Tetrahydrofuran, werden bei -70 °C 70 ml n-Butyllithium (1,6 molar in n-Hexan) zugetropft. Man röhrt eine halbe Stunde nach und gießt das Reaktionsgemisch auf 500 g festes Kohlendioxid. Nach Stehen über Nacht wird eingeeengt und der Rückstand zwischen H₂O, Natronlauge und Essigsäureethylester verteilt. Durch Einengen der Essigsäureethylesterphase lassen sich 2,0 g Ausgangsmaterial zurückgewinnen. Durch Ansäuern der wäßrigen Phase mit konz.

Salzsäure und Absaugen erhält man 8,30 g 5-Anilinocarbonyl-3-ethyl-4-isoxazolcarbonsäure, farblose Kristalle vom Fp. 150-152 °C (Verbindung Nr. 1015)

5 Beispiel 4

5,0 g 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäure werden in 200 ml Methanol gelöst und 5 ml konz. H_2SO_4 zugegeben. Nach 2 Tagen wird eingeengt, der Rückstand zwischen Essigsäureethylester und Wasser verteilt und die organische Phase eingeengt. Man erhält 4,0 g 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäuremethylester als farbloses Öl (Verbindung Nr. 1007).
 10 H-NMR ($CDCl_3$): δ = 1,48 (s;9H), 2,50(s;3H), 3,99(s;1H), 9,42 (bs;1H,NH).

Beispiel 5

15

a) 3-Ethyl-4-methoxycarbonyl-isothiazol-5-carbonsäurechlorid

73 g Carbonsäure aus Beispiel c und 80 g Thionylchlorid werden in 200 ml Toluol in Gegenwart von etwas Dimethylformamid bis zur Beendigung der Gasentwicklung zum Rückfluß erhitzt. Das nach dem Einengen in quantitativer Ausbeute verbleibende rohe Carbonsäurechlorid wird direkt weiter umgesetzt.

b) 5-iso-Propylaminocarbonyl-3-ethyl-isothiazol-4-carbonsäuremethylester

25

Zu 16,5 g rohem Säurechlorid aus a) in 200 ml Dichlormethan werden unter Eiskühlung 8,4 g iso-Propylamin langsam zugetropft. Man röhrt über Nacht nach, hydrolysiert mit 150 ml Wasser und trennt die organische Phase ab. Nach Waschen der organischen Phase mit Bicarbonatlösung, verdünnter Salzsäure und Wasser wird eingeengt. Man erhält 16,2 g 5-iso-Propylaminocarbonyl-3-ethyl-isothiazol-4-carbonsäuremethylester vom Fp. 55-56 °C (Verbindung Nr. 3007).

Beispiel 6

35 Zu 11 g Ester aus Beispiel 5 in 50 ml Ethanol werden 2,8 g KOH in 30 ml Wasser zugegeben und über Nacht bei Raumtemperatur nachgeführt. Man verdünnt mit 150 ml Wasser, extrahiert mit Ether und säuert die wäßrige Phase mit konz. Salzsäure an. Ausschütteln mit Dichlormethan und Einengen liefert 10 g 5-iso-Propylaminocarbonyl-3-ethyl-isothiazol-4-carbonsäure vom Fp. 138-140 °C (Verbindung Nr. 3006).

40

Beispiel 7

45 4,0 g 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazolcarbonsäuremethylester und 50 ml konz. Ammoniak werden 3 Stunden zum Rückfluß erhitzt. Nach dem Abkühlen wird mit Wasser verdünnt, mit Dichlormethan extrahiert und eingeengt. Man erhält 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-4-isoxazol-carbonamid als farblose Kristalle vom Fp. 155-158 °C (Verbindung Nr. 1).

Beispiel 8

50

Zu 8 g 3-Methyl-isoxazol-5-carbonsäure-tert.-butylamid in 150 ml Tetrahydrofuran werden bei -78 °C 56 ml Butyllithium (1,6 molar in n-Hexan) zugetropft. Man röhrt 1 Stunde nach und tropft dann langsam 22 ml Dimethylformamid zu. Man lässt über Nacht auf Raumtemperatur kommen, hydrolysiert mit Wasser, neutralisiert mit konzentrierter Salzsäure und extrahiert mit Ether. Das nach dem Einengen verbleibende Öl wird an Kieselgel mit Cyclohexan/Essigester chromatographiert. Man erhält als erste Fraktion 4-Formyl-3-methylisoxazol-5-carbonsäure-tert.-butylamid, hellgelbe Kristalle vom Fp. 36-38 °C (Verbindung Nr. 2).

Beispiel 9

a) 3-Methyl-4-ethoxycarbonyl-isoxazol-5-carbonsäurechlorid

5 13,3 g Carbonsäure aus Beispiel b und 20 ml Thionylchlorid werden in Gegenwart von etwas Dimethylformamid bis zur Beendigung der Gasentwicklung zum Rückfluß erhitzt. Das nach dem Einengen in quantitativer Ausbeute verblaibende rohe Carbonsäurechlorid wird direkt weiter umgesetzt.

10 b) Zu 5 g rohem Säurechlorid aus a) in 100 g Dichlormethan werden unter Eiskühlung 3,4 g Diethylamin langsam zugetropft. Man röhrt über Nacht nach, hydrolysiert mit Wasser und trennt die organische Phase ab. Nach Waschen der organischen Phase mit Bicarbonat wird eingeengt. Man erhält 5,0 g 5-Diethylaminocarbonyl-3-methyl-isoxazol-4-carbonsäureethylester als braunes Öl (Verbindung Nr. 3).
H-NMR (CDCl₃): δ = 1.15(t;3H), 1.27 und 1.31(2t;6H), 2.50(s;3H), 3.17(q;2H), 3.58(q;2H), 4.28(q;2H).

15 Beispiel 10

5,0 g Ester aus Beispiel 9 und 1,4 g Kaliumhydroxid werden in 10 ml Wasser und 20 ml Ethanol bei Raumtemperatur gerührt. Nach beendeter Reaktion verdünnt man mit Wasser und extrahiert mit Dichlormethan. Anschließend wird die wäßrige Phase mit Salzsäure angesäuert, mit Dichlormethan extrahiert und eingeengt. Man erhält 3,0 g 5-Diethylaminocarbonyl-3-methyl-isoxazol-4-carbonsäure als helles Öl (Verbindung Nr. 4).
H-NMR (CDCl₃): δ = 1.28 und 1.32(2t;6H), 2.60(s;3H), 3.59 und 3.62(2q;4H), 10.50(bs;1H,COOH).

25 Beispiel 11

Zu einer gerührten Suspension von 4,1 g 1-Methyl-2-chlor-pyridiniumiodid in 40 ml Dichlormethan tropft man bei Raumtemperatur ein Gemisch aus 1,2 g 2-Methyl-propan-2-thiol, 3,0 g 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-isoxazol-4-carbonsäure und 5,9 g Tri-n-butylamin in 20 ml Dichlormethan. Man erhitzt 3 h unter Rückfluß, zieht das Solvents im Vakuum ab und reinigt das Rohprodukt durch Säulenchromatographie an Kieselgel. Man erhält 2,1 g 5-tert.-Butylaminocarbonyl-3-methyl-isoxazol-4-carbonsäure-tert.-butylthioester als gelbes Öl (Verbindung Nr. 2003).

Analog den Beispielen 1 bis 10 können beispielsweise die in den folgenden Tabellen 1 bis 3 angeführten Verbindungen hergestellt werden.

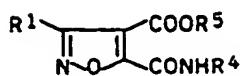
40

45

50

55

Tabelle 1

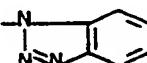
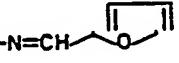


| 6 | Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|---------------------------------|-----------------|--|---|
| | 1001 | H | H | i-C ₃ H ₇ | |
| 10 | 1002 | H | H | tert.-C ₄ H ₉ | δ1 1.55(s;9H), 7.50 (bs; 1H, NH), 8.78(s;1H) |
| | 1003 | CH ₃ | H | H | 266-268 |
| 15 | 1004 | CH ₃ | H | i-C ₃ H ₇ | 86- 92 |
| | 1005 | CH ₃ | CH ₃ | i-C ₃ H ₇ | 64- 66 |
| | 1006 | CH ₃ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 92- 94 |
| | 1007 | CH ₃ | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 20 | 1008 | CH ₃ | H | 1-Ethylcyclohexyl | 119-121 |
| | 1009 | CH ₃ | H | 4-Methyltetrahydro- pyran-4-yl | 80- 87 |
| | 1010 | CH ₃ | H | C ₆ H ₅ | 204-210 |
| 25 | 1011 | CH ₃ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 233-237 |
| | 1012 | CH ₃ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 188-191 |
| | 1013 | C ₂ H ₅ | H | i-C ₃ H ₇ | 63- 66 |
| | 1014 | C ₂ H ₅ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 53- 58 |
| 30 | 1015 | C ₂ H ₅ | H | C ₆ H ₅ | 150-152 |
| | 1016 | C ₂ H ₅ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 193-196 |
| | 1017 | C ₂ H ₅ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 160-162 |
| | 1018 | i-C ₃ H ₇ | H | H | |
| | 1019 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₃ | 147-148 |
| 35 | 1020 | i-C ₃ H ₇ | H | C ₂ H ₅ | 100-101 |
| | 1021 | i-C ₃ H ₇ | H | n-C ₃ H ₇ | 85- 86 |
| | 1022 | i-C ₃ H ₇ | H | i-C ₃ H ₇ | 98- 99 |
| | 1023 | i-C ₃ H ₇ | H | n-C ₄ H ₉ | 96- 97 |
| 40 | 1024 | i-C ₃ H ₇ | H | i-C ₄ H ₉ | 112-114 |
| | 1025 | i-C ₃ H ₇ | H | sec-C ₄ H ₉ | δ1 1.00(t;3H), 1.32(d;3H), 1.37(d;6H), 1.64(quint; 2H), 3.78(sept; 1H), 4.15 (m;1H), 7.00 (bs;1H,NH) |
| 45 | | | | | |
| 50 | | | | | |

| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|-----|------|-------------------------------------|----|--|
| 5 | 1026 | i-C ₃ H ₇ | H | tert.-C ₄ H ₉ 94- 98 |
| | 1027 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ C ₂ H ₅ 44- 46 |
| | 1028 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ C ₃ H ₇ 52- 53 |
| | 1029 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃ 89-91 |
| | 1030 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ CH ₂ SCH ₃ ö1 1.35(d;3H), 1.56(s;6H), 2.18(s;3H), 2.99(s;2H), 3.77(sept;1H), 7.30(bs;1H, NH) |
| 10 | 1031 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ CH ₂ SCH ₃ |
| | 1032 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ CH ₂ CH ₂ SCH ₃ 116-118 |
| | 1033 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ CH ₂ OCH ₃ 69- 71 |
| | 1034 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂ |
| | 1035 | i-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₃ H ₅ 74- 76 |
| 20 | 1036 | i-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₆ H ₁₁ 112-114 |
| | 1037 | i-C ₃ H ₇ | H | 1-Ethylcyclohexyl 89- 90 |
| | 1038 | i-C ₃ H ₇ | H | 4-Methyltetrahydro- pyran-4-yl 129-130 |
| | 1039 | i-C ₃ H ₇ | H | 1-C(CH ₃) ₂ -cycloC ₆ H ₁₁ 144-146 |
| | 1040 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ CH=CH ₂ 92- 94 |
| 25 | 1041 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ CH=CH ₂ ö1;1.35(d;6H), 1.62(s;6H), 3.78(sept;1H), 5.20(d;1H), 5.25(d;1H), 6.10(dd;1H), 7.10(bs;1H, NH) |
| | 1042 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ C ₆ H ₅ ö1 1.30(d;6H), 3.74(sept;1H), 4.70(d;2H), 7.35(bs;5H), 7.85(bt;1H, NH) |
| | 1043 | i-C ₃ H ₇ | H | C(CH ₃) ₂ C ₆ H ₅ |
| | 1044 | i-C ₃ H ₇ | H | CH ₂ C(CH ₃) ₃ 76 |
| | 1045 | i-C ₃ H ₇ | H | C ₆ H ₅ 138-140 |
| 30 | 1046 | i-C ₃ H ₇ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ 170-173 |
| | 1047 | i-C ₃ H ₇ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ 127 |
| | 1048 | tert.-C ₄ H ₉ | H | i-C ₃ H ₇ 84- 85 |
| | 1049 | tert.-C ₄ H ₉ | H | tert.-C ₄ H ₉ 129-133 |
| | | | | |

| s | Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/1H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|--------------------------------------|---|--|--|
| | 1050 | tert.-C ₄ H ₉ | H | C ₆ H ₅ | 132-137 |
| | 1051 | tert.-C ₄ H ₉ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 188-191 |
| | 1052 | tert.-C ₄ H ₉ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 160-162 |
| 10 | 1053 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | H | i-C ₃ H ₇ | 116-118 |
| | 1054 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 158-159 |
| | 1055 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 142-143 |
| | 1056 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | H | cyclo-C ₆ H ₁₁ | |
| 15 | 1057 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | H | C ₆ H ₅ | 198-199 |
| | 1058 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | H | i-C ₃ H ₇ | 165-168 |
| | 1059 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 165-168 |
| | 1060 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | H | C ₆ H ₅ | 220 |
| 20 | 1061 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | |
| | 1062 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 209-211 |
| | 1063 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | cyclo-C ₃ H ₅ | 108-109 |
| | 1064 | CH ₃ | H | C(CH ₃) ₂ C≡CH | 80- 87 |
| 25 | 1065 | CH ₃ | C ₂ H ₅ | C(CH ₃) ₂ C≡CH | 82- 86 |
| | 1066 | CH ₃ | Na [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 220 |
| | 1067 | CH ₃ | K [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 288 |
| | 1068 | CH ₃ | H ₃ N [⊕] CH(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 184-187 |
| 30 | 1069 | CH ₃ | H ₃ N [⊕] -CH ₂ CH ₂ OH | tert.-C ₄ H ₉ | 124-126 |
| | 1070 | C ₂ H ₅ | Na [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 150 |
| | 1071 | C ₂ H ₅ | K [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 220 |
| | 1072 | C ₂ H ₅ | H ₃ N [⊕] -CH(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 170-172 |
| 35 | 1073 | C ₂ H ₅ | H ₃ N [⊕] -CH ₂ CH ₂ OH | tert.-C ₄ H ₉ | 105-108 |
| | 1074 | C ₂ H ₅ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 163-165 |
| | 1075 | C ₂ H ₅ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 68- 70 |
| | 1076 | C ₂ H ₅ | CH ₂ C≡CH | tert.-C ₄ H ₉ | ö1 1.35(t;3H), 1.48(s;9H), 2.63(t;1H), 2.96; 4.98 (d;2H), 8.95(bs; 1H, NH) |
| 40 | | | | | |
| 45 | 1077 | C ₂ H ₅ | CH ₂ CH ₂ OC ₂ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | 74- 76 |
| | 1078 | cyclo-C ₃ H ₅ | H | i-C ₃ H ₇ | 78- 80 |
| | 1079 | cyclo-C ₃ H ₅ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 87- 88 |
| 50 | 1080 | cyclo-C ₃ H ₅ | H | C ₆ H ₅ | 162-163 |
| | 1081 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | Succinimido | i-C ₃ H ₇ | 126-127 |
| | 1082 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 172-174 |
| | 1083 | cyclo-C ₆ H ₁₁ | Succinimido | C ₆ H ₅ | 176-177 |
| 55 | 1084 | Tetrahydro- pyran-3-yl | H | i-C ₃ H ₇ | 157-160 |

| | Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|---------------------------|---|-------------------------------------|---|
| 5 | 1085 | Tetrahydro- pyran-3-yl | H | tert.-C ₄ H ₉ | 91- 95 |
| | 1086 | Tetrahydro- pyran-3-yl | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 158-160 |
| 10 | 1087 | Tetrahydro- pyran-3-yl | H | C ₆ H ₅ | 152-157 |
| | 1088 | CH ₃ | Pyrid-3-yl- methyl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 15 | 1089 | CH ₃ | Thien-2-yl- methyl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1090 | CH ₃ | -CH ₂ -CH ₂ -N(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 20 | 1091 | CH ₃ | -CH ₂ -CH ₂ N(CH ₃) ₃ I [⊕] ⊖ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1092 | CH ₃ | -CH ₂ -CF ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1093 | CH ₃ | -CH ₂ -C(CH ₃)=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 25 | 1094 | CH ₃ | -CH ₂ C(Cl)=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1095 | CH ₃ | -CH ₂ -C≡C-CH ₂ OH | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1096 | CH ₃ | -CH ₂ -CH(OCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 30 | 1097 | CH ₃ | -CH ₂ -CH(OH) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1098 | CH ₃ | -CH ₂ -CH(OCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 35 | 1099 | CH ₃ | Phenethyl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1100 | CH ₃ | -CH(C ₆ H ₅)COOCH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 40 | 1101 | CH ₃ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1102 | CH ₃ | -CH ₂ -OCH ₂ -C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1103 | CH ₃ | Tetrahydro- pyran-2-yl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 45 | 1104 | CH ₃ | Tetrahydro- fur-2-yl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1105 | CH ₃ | (4-Brom-benzoyl)- methyl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 50 | 1106 | CH ₃ | (4-Methoxybenzoyl) methyl | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1107 | CH ₃ | -CH(COOCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |

| Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|-----|----------------|-------------------------------|---|---|
| 5 | 1108 | CH ₃ | Phthalimidomethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1109 | CH ₃ | -CH ₂ -CH ₂ -Si(CH ₃) ₃ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1110 | CH ₃ | -CH ₂ -CH ₂ -O-N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1111 | CH ₃ | -CH ₂ -PO(OC ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 10 | 1112 | CH ₃ | Fur-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1113 | CH ₃ | Tetrahydrofur-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1114 | CH ₃ | Pyrid-2-ylmethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| 15 | 1115 | CH ₃ | Pyrid-4-ylmethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1116 | CH ₃ | Piperidino | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1117 | CH ₃ | Phthalimido | tert.-C ₄ H ₉ |
| 20 | 1118 | CH ₃ |  | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1119 | CH ₃ | -N=CH-C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 25 | 1120 | CH ₃ |  | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1121 | CH ₃ | -CH(CH ₃)CH(OCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1122 | CH ₃ | -CH ₂ -CON(C ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 30 | 1123 | CH ₃ | N(C ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1124 | C ₂ H ₅ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1125 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -OCH ₂ -C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1126 | C ₂ H ₅ | Tetrahydro-pyran-2-yl | tert.-C ₄ H ₉ |
| 35 | 1127 | C ₂ H ₅ | Tetrahydro-fur-2-yl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1128 | C ₂ H ₅ | (4-Brom-benzoyl)-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| 40 | 1129 | C ₂ H ₅ | (4-Methoxybenzoyl)-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1130 | C ₂ H ₅ | -CH(COOCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 45 | | | | |

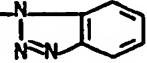
| Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|-----|----------------|-------------------------------|--|---|
| 5 | 1131 | C ₂ H ₅ | Phthalimidomethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1132 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CH ₂ -Si(CH ₃) ₃ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1133 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CH ₂ -O-N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1134 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -PO(OC ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 10 | 1135 | C ₂ H ₅ | Fur-2-ylmethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1136 | C ₂ H ₅ | Tetrahydrofur-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1137 | C ₂ H ₅ | Pyrid-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| 15 | 1138 | C ₂ H ₅ | Pyrid-4-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1139 | C ₂ H ₅ | Pyrid-3-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1140 | C ₂ H ₅ | Thien-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1141 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CH ₂ -N(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 20 | 1142 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CH ₂ N(CH ₃) ₃ ⁺ I ⁻ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1143 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CF ₃ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1144 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -C(CH ₃)=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 25 | 1145 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ C(Cl)=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1146 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -C≡C-CH ₂ OH | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1147 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CH(X)-O-CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 30 | 1148 | C ₂ H ₅ | CH ₂ -OH | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1149 | C ₂ H ₅ | CH ₂ -CH(O)-CH ₂ -O- | tert.-C ₄ H ₉ |
| 35 | 1150 | C ₂ H ₅ | Phenethyl | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1151 | C ₂ H ₅ | -CH(C ₆ H ₅)COOCH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ |
| 40 | 1152 | C ₂ H ₅ | Piperidino | tert.-C ₄ H ₉ |
| | 1153 | C ₂ H ₅ | Phthalimido | tert.-C ₄ H ₉ |

45

50

55

| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|------|---------------------------------|--|--|--|--|
| 5 | | | | | |
| 1154 | C ₂ H ₅ | | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1155 | C ₂ H ₅ | -N=CH-C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 10 | | | | | |
| 1156 | C ₂ H ₅ | | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1157 | C ₂ H ₅ | -CH(CH ₃)CH(OCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 15 | 1158 | C ₂ H ₅ | -CH ₂ -CON(C ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1159 | C ₂ H ₅ | N(C ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1160 | i-C ₃ H ₇ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1161 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -OCH ₂ -C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 20 | 1162 | i-C ₃ H ₇ Tetrahydro- | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| | | pyran-2-yl | | | |
| 1163 | i-C ₃ H ₇ | Tetrahydro- | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| | | fur-2-yl | | | |
| 1164 | i-C ₃ H ₇ | (4-Brom-benzoyl)- | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 25 | | methyl | | | |
| 1165 | i-C ₃ H ₇ | (4-Methoxybenzoyl) | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| | | methyl | | | |
| 1166 | i-C ₃ H ₇ | -CH(COOCH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 30 | 1167 | i-C ₃ H ₇ Phthalimidomethyl | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1168 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -CH ₂ -Si(CH ₃) ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 64- 69 | |
| 1169 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -CH ₂ -O-N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 35 | 1170 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -PO(OC ₂ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1171 | i-C ₃ H ₇ | Fur-2-ylmethyl | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1172 | i-C ₃ H ₇ | Tetrahydrofur-2- | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| | | yl-methyl | | | |
| 40 | 1173 | i-C ₃ H ₇ Pyrid-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ | Öl; 1.30(s;6H) 1.44 (s;9H); 3.40 (sept;1H) 5.52 (s;2H) 7.20-8,64 (m;4H), 8.60 (bs;1H,NH) | |
| 45 | | | | | |
| 1174 | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-4-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1175 | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-3-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 50 | 1176 | i-C ₃ H ₇ Thien-2-yl-methyl | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1177 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -CH ₂ -N(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 55 | 1178 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -CH ₂ ⁺ N(CH ₃) ₃ ⁻ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 1179 | i-C ₃ H ₇ | -CH ₂ -CF ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | | |
| 65 | 1352 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -C(CH ₃)=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | | |

| | Nr. | R ₁ | R ₅ | R ₄ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|--|---|-------------------------------------|--|
| 5 | 1353 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ C(Cl)=CH ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1354 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -C≡C-CH ₂ OH | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 10 | 1355 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -CH(OCH ₃) ₂ | X | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1356 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -CH(OH) ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 15 | 1357 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -CH(OCH ₂) ₂ | =O | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1180 | i-C ₃ H ₇ Phenethyl | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 20 | 1181 | i-C ₃ H ₇ -CH(C ₆ H ₅)COOCH ₃ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1182 | i-C ₃ H ₇ Piperidino | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1183 | i-C ₃ H ₇ Phthalimido | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 25 | 1184 | i-C ₃ H ₇ |  | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1185 | i-C ₃ H ₇ -N=CH-C ₆ H ₅ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 30 | 1186 | i-C ₃ H ₇ -N=CH-  | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1187 | i-C ₃ H ₇ -CH(CH ₃ CH ₂)(OCH ₃) ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1188 | i-C ₃ H ₇ -CH ₂ -CON(C ₂ H ₅) ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | 91- 93 |
| 35 | 1189 | i-C ₃ H ₇ N(C ₂ H ₅) ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1190 | CH ₃ -N=CH ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | 108-109 |
| | 1191 | CH ₃ Cyclohexanimino | | tert.-C ₄ H ₉ | 91- 92 |
| | 1192 | CH ₃ -N=C(cyclo-C ₃ H ₅) ₂ | | tert.-C ₄ H ₉ | 50- 52 |
| 40 | 1193 | CH ₃ H | | -N(CH ₃) ₂ | 225-227 |
| | 1194 | CH ₃ H | | Piperidino | 162-164 |
| | 1195 | CH ₃ CH ₂ -C≡CH | | tert.-C ₄ H ₉ | 90- 95 |
| | 1197 | CH ₃ 2-NO ₂ -4-F-C ₆ H ₃ | | tert.-C ₄ H ₉ | 81;1.44(s;9H), 2.59(s;3H), 7.24 und 8.30 (m;3H), 8.16 (bs;1H,NH) |
| 45 | | | | | |
| 50 | | | | | |

| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|------|------------------|--|--|---|---|
| 1198 | CH ₃ | 3,5-(CF ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 156-159 | |
| 5 | -CH ₃ | H | CH ₃ | 192-197 | |
| 1200 | CH ₃ | H | -OC ₂ H ₅ | 145-148 | |
| 1201 | CH ₃ | H | cyclo-C ₄ H ₇ | 141-142 | |
| 1202 | CH ₃ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 135-137 | |
| 10 | 1203 | CH ₃ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | 91- 93 |
| | 1204 | CH ₃ | H | C ₂ H ₅ | 151-154 |
| | 1205 | CH ₃ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₄ H ₇ | 77- 79 |
| | 1207 | CH ₃ | CH ₂ CO ₂ CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 88- 89 |
| 15 | 1208 | C ₂ H ₅ | Succinimido | i-C ₃ H ₇ | 132-136 |
| | 1209 | n-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₆ H ₁₁ | 132-134 |
| | 1210 | n-C ₃ H ₇ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 82- 83 |
| | 1211 | n-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 66- 68 |
| 20 | 1212 | n-C ₃ H ₇ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 126-129 |
| | 1213 | n-C ₃ H ₇ | Succinimido | cyclo-C ₃ H ₅ | 104-106 |
| | 1214 | n-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | δ1 0.70(m;2H), 0.90(m;2H), 1.00(t;3H), 1.78(m;2H), 2.16 und 2.19 (2s;6H), 2.92 (t;2H), 3.00 (m;1H), 9.24 (bs;1H,NH) |
| 25 | | | | | |
| 30 | | | | | |
| | 1215 | n-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 104-106 |
| | 1216 | n-C ₃ H ₇ | H | i-C ₃ H ₇ | 70- 71 |
| 35 | 1217 | n-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | i-C ₃ H ₇ | 72- 73 |
| | 1218 | n-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₆ H ₁₁ | 110-111 |
| | 1219 | n-C ₃ H ₇ | H | C ₆ H ₅ | 165-166 |
| | 1220 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 112-113 |
| 40 | | | | | |
| | 1221 | i-C ₃ H ₇ | -N=C CH ₃ C ₂ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | 83- 86 |
| 45 | 1222 | i-C ₃ H ₇ | Cyclohexanimino | tert.-C ₄ H ₉ | 91- 94 |
| | 1223 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(cyclo-C ₃ H ₅) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 70- 75 |
| 50 | 1224 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | Tetrahydrofur-3-yl | 104-106 |
| | 1225 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | Tetrahydrofur-3-yl | 160-162 |

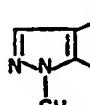
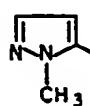
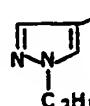
| Nr. | R ¹ - | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|------|---------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--|---------|
| 5 | | | | | |
| 1226 | i-C ₃ H ₇ | H | Tetrahydrofur-3-yl | ö1 1.33(d;6H), 2.40(m;2H), 3.75(sept;1H), 4.00(m;4H), 4.75 (m;1H), 8.25 (d;1H, NH) | |
| 10 | | | | | |
| 1227 | i-C ₃ H ₇ | H | | 134-135 | |
| 1228 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | OC ₂ H ₅ | 146-148 | |
| 1229 | i-C ₃ H ₇ | H | Thiazol-2-yl | 195 | |
| 20 | 1230 | i-C ₃ H ₇ | H | 5-Methyl-thiazol- 2-yl | 248 |
| 1231 | i-C ₃ H ₇ | H | 5-Ethyl-thiazol- 2-yl | 228-230 | |
| 25 | 1232 | i-C ₃ H ₇ | H | 5-n-Propyl-thiazol- 2-yl | 160-163 |
| 1233 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 141-144 | |
| 1234 | i-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₄ H ₇ | 95- 96 | |
| 30 | 1235 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₄ H ₇ | 100-101 |
| 1236 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | -N(CH ₃) ₂ | 129-131 | |
| 1237 | i-C ₃ H ₇ | H | -N(CH ₃) ₂ | 163-165 | |
| 1238 | i-C ₃ H ₇ | H | Piperidino | 167-168 | |
| 1239 | i-C ₃ H ₇ | H | Morpholino | 177-179 | |
| 35 | 1240 | i-C ₃ H ₇ | H | cyclo-C ₅ H ₉ | 62- 65 |
| 1241 | i-C ₃ H ₇ | H | Cyclopropylmethyl | 88- 90 | |
| 1242 | i-C ₃ H ₇ | H | s-C ₄ H ₉ | ö1;1.00(t;3H), 1.34(d;3H), 1.37(d;6H), 1.66(quint;2H), 3.78 (sept;1H), 4.17(m;1H), 7.04 (d,1H, NH) | |
| 40 | | | | | |
| 1243 | i-C ₃ H ₇ | -N=C(CH ₃) ₂ | s-C ₄ H ₉ | ö1;0.98 (t;3H), 1,26 (d,3H), 1,39 (d,6H) 1,64 (quint; 2H), 2,16 und 2,18 (2s; 6H) 3,44 (sept;1H), 4,10 (m,1H), 8,54 (d,1H, NH) | |
| 45 | | | | | |
| 50 | | | | | |
| 55 | | | | | |

| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|------|---------------------------------|---|---|---|---------|
| 5 | | | | | |
| 1244 | i-C ₃ H ₇ | H | Gemisch aus 4-Methyl-5-carboxy- thiazol-2-yl und 4-Methyl-thiazol-2-yl | 197 | |
| 10 | | | | | |
| 1245 | i-C ₃ H ₇ | CH ₂ -CH=CH-C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | 59- 63 | |
| 1246 | i-C ₃ H ₇ | 4-CO ₂ CH ₃ C ₆ H ₄ | tert.-C ₄ H ₉ | 143-145 | |
| 1247 | i-C ₃ H ₇ | CH ₂ -CH ₂ -CN | tert.-C ₄ H ₉ | 67- 71 | |
| 15 | 1248 | CH ₂ -CCl ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 72- 75 | |
| 1249 | i-C ₃ H ₇ | 4-NHCOCH ₃ -C ₆ H ₄ | tert.-C ₄ H ₉ | 212-214 | |
| 1250 | i-C ₃ H ₇ | 2,4-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 140-141 | |
| 20 | 1251 | i-C ₃ H ₇ | Cyclooctanimino | ö1, 1,37(d, 6H), 1,47(s; 9H), 1,28-1,93 (m; 10H), 2,54 (m; 4H), 3,44 (sept, 1H), 8,44 (bs; 1H, NH) | |
| 25 | 1252 | i-C ₃ H ₇ (CH ₂) ₂ O(CH ₂) ₂ OCH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | ö1, 1,34(d; 6H), 1,47 (s; 9H), 3,39 (s; 3H), 3,45 (sept; 1H), 3,60 (m; 4H), 3,84 und 4,50 (m; 4H), 8,94 (bs; 1H, NH) | |
| 30 | | | | | |
| 35 | 1253 | i-C ₃ H ₇ | CH ₂ -CH ₂ -S-CH ₃ | 46- 48 | |
| 1254 | i-C ₃ H ₇ | Pyrid-2-yl | tert.-C ₄ H ₉ | 155-163 | |
| 40 | 1255 | i-C ₃ H ₇ | CH ₂ -CH ₂ -Cl | tert.-C ₄ H ₉ | 70- 72 |
| 1263 | n-C ₄ H ₉ | H | CH ₃ | 146-149 | |
| 1264 | n-C ₄ H ₉ | H | i-C ₃ H ₇ | 60- 63 | |
| 1265 | n-C ₄ H ₉ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 112-114 | |
| 45 | 1266 | n-C ₄ H ₉ | H | C ₆ H ₅ | 145-150 |
| 50 | | | | | |
| 55 | | | | | |

| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|-----|------|---------------------------------|---|---|
| 5 | 1267 | n-C ₄ H ₉ | H | tert.-C ₄ H ₉ 52- 54 |
| | 1268 | n-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ 58- 62 |
| | 1269 | n-C ₄ H ₉ | -CH ₂ CCl ₃ | tert.-C ₄ H ₉ ö1 0,92 (t;3H), 1,43 (m,2H), 1,48(s;9H), 1,74(m;2H) |
| 10 | | | | 3,00(t;2H), 5,01(s;2H), 8,80(bs;1H;NH) |
| | 1270 | n-C ₄ H ₉ | 2,6-Br ₂ -4-CN-C ₆ H ₂ | tert.-C ₄ H ₉ 165-170 |
| 15 | 1271 | n-C ₄ H ₉ | -CH ₂ -CH=CH ₂ | tert.-C ₄ H ₉ ö1 0,92(t;3H), 1,41(m;2H), 1,46(s;9H), 1,66(m;2H), 2,89(t;2H), 4,88(d;2H), 5,40(m;2H), 6,01(m;1H), 9,19(bs;1H,NH) |
| | | | | |
| | 20 | | | |
| | 1272 | n-C ₄ H ₉ | 2,4-Dichlorbenzyl | tert.-C ₄ H ₉ 81- 86 |
| | 1273 | n-C ₄ H ₉ | H | Cyclopropylmethyl 65- 70 |
| | 1274 | s-C ₄ H ₉ | H | i-C ₃ H ₇ ö1 0,92 (t,3H), 1,34(d,3H), 1,39(d;6H), 1,76(m;2H), 3,65(m;1H), 4,32(m;1H), 7,08 (bs;1H,NH) |
| 25 | | | | |
| | 1275 | s-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | i-C ₃ H ₇ 80 - 84 |
| | 1276 | s-C ₄ H ₉ | H | cyclo-C ₃ H ₇ 78- 85 |
| 30 | 40 | 1277 | s-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ cyclo-C ₃ H ₅ ö1 0,70(m,;2H), 0,90 (m;2H), 0,92 (t;3H), 1,34 (d;3H), 1,79 (m;2H), 2,14 und 2,18 (2s;6H), 2,97 (m;1H), 3,24 (m;1H), 8,80 (bs,1H,NH) |
| | | | | |
| | 35 | | | |
| | 40 | | | |
| | 45 | | | |
| 50 | | | | |
| | 55 | | | |

| 5 | Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|---|
| | 1278 | s-C ₄ H ₉ | Succinimido | cyclo-C ₃ H ₅ | 112-115 |
| | 1279 | s-C ₄ H ₉ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 93- 95 |
| 10 | 1280 | s-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | ö1 0,92 (t,3H), 1,34 (d;3H), 1,48 (s;9H), 1,80 (m;2H), 2,12 und 2,16 (2s;6H), 3,26 (m,1H), 8,29 (bs,1H,NH) |
| 15 | 1281 | s-C ₄ H ₉ | H | C ₆ H ₅ | 117-120 |
| 20 | 1282 | s-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | C ₆ H ₅ | ö1, 0,93(t;3H), 1,36 (d;3H), 1,80 (m;2H), 2,14 und 2,18 (2s;6H), 3,28 (m;1H), 7,10-7,80(m;5H) 10,90(bs;1H),NH) |
| 25 | 1283 | tert.-C ₄ H ₉ | Succinimido | i-C ₃ H ₇ | 137-140 |
| 30 | 1284 | tert.-C ₄ H ₉ | Succinimido | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 238-242 |
| | 1285 | tert.-C ₄ H ₉ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 144-146 |
| | 1286 | tert.-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 86- 90 |
| 35 | 1287 | tert.-C ₄ H ₉ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 75- 77 |
| | 1288 | tert.-C ₄ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | 93- 98 |
| | 1290 | neo-C ₅ H ₁₁ | H | CH ₃ | 130-133 |
| | 1291 | neo-C ₅ H ₁₁ | H | i-C ₃ H ₇ | 100-104 |
| | 1292 | neo-C ₅ H ₁₁ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 133-136 |
| 40 | 1293 | neo-C ₅ H ₁₁ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | 56- 62 |
| | 1294 | neo-C ₅ H ₁₁ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 112-117 |
| | 1295 | neo-C ₅ H ₁₁ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 107-111 |
| | 1296 | neo-C ₅ H ₁₁ | H | C ₆ H ₅ | 205-207 |
| 45 | 1297 | cyclo-C ₃ H ₅ | Succinimido | i-C ₃ H ₇ | 131-133 |
| | 1298 | cyclo-C ₃ H ₅ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 167-168 |
| | 1299 | cyclo-C ₃ H ₅ | Succinimido | C ₆ H ₅ | 168-170 |
| | 1300 | cyclo-C ₃ H ₅ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 139-140 |
| 50 | 1301 | cyclo-C ₃ H ₅ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | ö1 0,80 (m;8H), 2,02 und 2,04 (2s; 6H), 2,30 (m;1H), 2,86 (m;1H), 9,20 (d;1H,NH) |
| 55 | | | | | |

| | Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|---|---|-------------------------------------|--|
| 5 | 1302 | cyclo-C ₃ H ₅ | -N=C(cyclo-C ₃ H ₅) ₂ | cyclo-C ₃ H ₇ | 106-108 |
| 10 | 1303 | cyclo-C ₃ H ₅ | H | cyclo-C ₅ H ₉ | 106-109 |
| | 1304 | cyclo-C ₃ H ₅ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₅ H ₉ | 125-127 |
| 15 | 1305 | cyclo-C ₅ H ₉ | H | C ₆ H ₅ | 170-171 |
| | 1306 | cyclo-C ₅ H ₉ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 118-120 |
| 20 | 1307 | cyclo-C ₅ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | cyclo-C ₃ H ₅ | 55- 57 |
| | 1308 | cyclo-C ₅ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | CH ₃ | 100-101 |
| 25 | 1309 | cyclo-C ₅ H ₉ | H | CH ₃ | 166-167 |
| | 1310 | cyclo-C ₅ H ₉ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 125-126 |
| 30 | 1311 | cyclo-C ₅ H ₉ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 112-114 |
| | 1312 | Tetrahydro- pyran-3-yl | Succinimido | C ₆ H ₅ | 80 |
| 35 | 1313 | 2-CH ₃ O-C ₆ H ₄ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 179-184 |
| | 1314 | 2-CH ₃ O-C ₆ H ₄ | H | cyclo-C ₄ H ₉ | 177-180 |
| 40 | 1315 | 2,6F ₂ -C ₆ H ₃ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 128-135 |
| | 1316 | 2,6F ₂ -C ₆ H ₃ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 134-138 |
| 45 | 1317 | CH ₃ -O- | H | tert.-C ₄ H ₉ | δ1 1,52 (s;9H), 4,12(s;3H), 7,16(bs;1H,NH) |
| | 1318 | CH ₃ -O-CH ₂ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 95-100 |
| 50 | 1319 | CH ₃ -O-CH ₂ | H | cyclo-C ₃ H ₅ | 90- 95 |
| | 1320 | CH ₃ -O-CH ₂ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 65- 70 |
| 55 | 1321 | CH ₃ -O-CH(CH ₃)- | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | δ1 1,45 (s;9H) 1,60 (d;3H), 2,16 und 2,18 (2s;6H), 3,34 (s;3H), 4,87 (quart.; 1H) 8,10(bs;1H,NH) |
| | 1322 | CH ₃ -O-CH(CH ₃)- | H | tert.-C ₄ H ₉ | 69 - 71 |
| 60 | 1323 | CH ₃ -O-CH(CH ₃)- | 2,6-Br ₂ -4-CN-C ₆ H ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 118-120 |
| | 1324 | CH ₃ | CH(CH ₃)CO ₂ CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | δ1 1,46 (s;9H) 2,54 (s;3H) 3,82 (s;3H), 5,40(quart.;1H) 9,00(bs;1H,NH) |

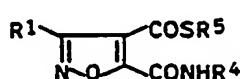
| Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|-----|------|---|---|---|--|
| 5 | 1325 | CH ₃ | 2,6-Br ₂ -4-CN-C ₆ H ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 143-146 |
| | 1326 |  | H | tert.-C ₄ H ₉ | 168-170 |
| 10 | 1327 |  | H | tert.-C ₄ H ₉ | 157 |
| 15 | 1328 |  | H | tert.-C ₄ H ₉ | 254 |
| 20 | 1329 |  | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | δ 1, 5 (s, 9H), 3, 8 (s; 3H), 3, 9 (s; 3H), 6, 5 (d; 1H), 7, 6 (d; 1H), 8, 7 (bs, 1H, NH) |
| 25 | 1330 |  | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 120-122°C |
| 30 | 1331 |  | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | δ 1, 5 (s; 9H), 3, 7 (s; 3H), 3, 8 (s; 3H), 3, 9 (s; 3H), 6, 0 (s; 1H), 9, 2 (bs, 1H, NH) |
| 35 | 1332 |  | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| | 1333 |  | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 40 | 1334 |  | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 45 | 1335 |  | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |

50

55

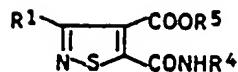
| Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|------|--|-------------------------------------|-------------------------------------|---|
| 1336 | Pyrid-2-yl | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1337 | Pyrid-2-yl | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1338 | Pyrid-3-yl | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1339 | Pyrid-3-yl | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1340 | Pyrid-4-yl | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1341 | Pyrid-4-yl | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1342 | 4-F-C ₆ H ₄ -CH ₂ | H | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1343 | 4-F-C ₆ H ₄ -CH ₂ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1344 | CH ₃ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1345 | CH ₃ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1346 | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1347 | C ₂ H ₅ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1348 | C ₂ H ₅ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1349 | i-C ₃ H ₇ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1350 | i-C ₃ H ₇ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 1351 | i-C ₃ H ₇ | Cyclopentanimino | tert.-C ₄ H ₉ | 113-115 |

Tabelle 2



| Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/ ¹ H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|------|---------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|---|
| 2001 | CH ₃ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 2002 | CH ₃ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 2003 | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | ö1; 1,46 (s; 9H), 1,60 (s; 9H), 2,50 (s; 3H), 7,94 (bs; 1H, NH) |
| 2004 | C ₂ H ₅ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 2005 | C ₂ H ₅ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 2006 | i-C ₃ H ₇ | C ₆ H ₅ | tert.-C ₄ H ₉ | |
| 2007 | i-C ₃ H ₇ | n-C ₄ H ₉ | tert.-C ₄ H ₉ | |

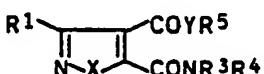
5 Tabelle 3



| | Nr. | R1 | R5 | R4 | Fp [°C]/H-NMR (CDCl ₃) [ppm] |
|----|------|---------------------------------|-----------------|--|---|
| 10 | 3001 | CH ₃ | H | i-C ₃ H ₇ | 153-154 |
| | 3002 | CH ₃ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 158-159 |
| 15 | 3003 | CH ₃ | H | C ₆ H ₅ | 178-183 |
| | 3004 | CH ₃ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 231 |
| | 3005 | CH ₃ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 221-223 |
| | 3006 | C ₂ H ₅ | H | i-C ₃ H ₇ | 138-140 |
| 20 | 3007 | C ₂ H ₅ | CH ₃ | i-C ₃ H ₇ | 55- 56 |
| | 3008 | C ₂ H ₅ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 155-157 |
| | 3009 | C ₂ H ₅ | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 39 |
| | 3010 | C ₂ H ₅ | H | C ₆ H ₅ | 164 |
| | 3011 | C ₂ H ₅ | CH ₃ | C ₆ H ₅ | 130-131 |
| 25 | 3012 | C ₂ H ₅ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 202-204 |
| | 3013 | C ₂ H ₅ | CH ₃ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 158-159 |
| | 3014 | C ₂ H ₅ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 191-195 |
| | 3015 | C ₂ H ₅ | CH ₃ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 84 |
| 30 | 3016 | i-C ₃ H ₇ | H | i-C ₃ H ₇ | 160-162 |
| | 3017 | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | i-C ₃ H ₇ | 90- 91 |
| | 3018 | i-C ₃ H ₇ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 178-179 |
| | 3019 | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 38- 41 |
| 35 | 3020 | i-C ₃ H ₇ | H | C ₆ H ₅ | 171-172 |
| | 3021 | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | C ₆ H ₅ | 92- 93 |
| | 3022 | i-C ₃ H ₇ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 185-186 |
| | 3023 | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 92- 93 |
| 40 | 3024 | i-C ₃ H ₇ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 177-179 |
| | 3025 | i-C ₃ H ₇ | CH ₃ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 37- 45 |
| | 3026 | C ₆ H ₅ | H | i-C ₃ H ₇ | 144 |
| | 3027 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | i-C ₃ H ₇ | 98-100 |
| 45 | 3028 | C ₆ H ₅ | H | tert.-C ₄ H ₉ | 209 |
| | 3029 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | tert.-C ₄ H ₉ | 130-131 |
| | 3030 | C ₆ H ₅ | H | C ₆ H ₅ | 204 |
| | 3031 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | C ₆ H ₅ | 100-101 |
| 50 | 3032 | C ₆ H ₅ | H | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 209 |
| | 3033 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | 4-Cl-C ₆ H ₄ | 157-158 |
| | 3034 | C ₆ H ₅ | H | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 217 |
| | 3035 | C ₆ H ₅ | CH ₃ | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | 131-132 |
| | 3036 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | i-C ₃ H ₇ | 98-100 |
| 55 | 3037 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | tert.-C ₄ H ₉ | 75- 76 |

| Nr. | R ¹ | R ⁵ | R ⁴ | Fp [°C]/H-NMR (CDCl ₃) [ppm] | |
|------|---------------------------------|--|---|---|---------|
| 5 | | | | | |
| 3038 | i-C ₃ H ₇ | Na [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 300 | |
| 3039 | i-C ₃ H ₇ | K [⊕] | tert.-C ₄ H ₉ | 110 | |
| 3040 | i-C ₃ H ₇ | Na [⊕] | C ₆ H ₅ | 330 | |
| 10 | 3041 | i-C ₃ H ₇ | K [⊕] | C ₆ H ₅ | 300 |
| 3042 | i-C ₃ H ₇ | H ₃ N-CH(CH ₃) ₂ | C ₆ H ₅ | 154-157 | |
| 15 | 3043 | i-C ₃ H ₇ | H ₃ N-CH ₂ -CH ₂ -OH | C ₆ H ₅ | 162-164 |
| 20 | 3044 | i-C ₃ H ₇ | Succinimido | C ₆ H ₅ | 161 |
| 3045 | CH ₃ | -N=C(CH ₃) ₂ | tert.-C ₄ H ₉ | 97- 98 | |

Analog können darüber hinaus beispielsweise weitere Verbindungen hergestellt werden mit der allgemeinen Struktur



25

wobei für X und Y Sauerstoff oder Schwefel, und beispielsweise
 R¹ für einen Rest aus der Gruppe Q1 bis Q61,
 R⁵ für einen Rest aus der Gruppe M1 bis M78,
 30 R³ für einen Rest aus der Gruppe P₁-P₁₁,
 R⁴ für einen Rest aus der Gruppe L1 bis L195 stehen und
 die Reste X, Y, P, Q, M und L beliebig kombiniert werden können.
 R¹, R⁵, R³ und R⁴ können beispielsweise die folgenden Reste bedeuten:

35

| Verb. | R ¹ | Verb. | R ¹ |
|-------|--|-------|--|
| Nr. | | Nr. | |
| 40 | Q1 H | Q24 | Tetrahydropyran-3-yl |
| | Q2 CH ₃ | | |
| | Q3 C ₂ H ₅ | Q25 | Tetrahydropyran-3-yl |
| | Q4 n-C ₃ H ₇ | Q26 | C ₆ H ₅ |
| 45 | Q5 i-C ₃ H ₇ | Q27 | 2-F-C ₆ H ₄ |
| | Q6 n-C ₄ H ₉ | Q28 | 3-F-C ₆ H ₄ |
| | Q7 i-C ₄ H ₉ | Q29 | 4-F-C ₆ H ₄ |
| | Q8 s-C ₄ H ₉ | Q30 | 2-Cl-C ₆ H ₄ |
| 50 | Q9 tert.-C ₄ H ₉ | Q31 | 3-Cl-C ₆ H ₄ |
| | Q10 cyclo-C ₃ H ₅ | Q32 | 4-Cl-C ₆ H ₄ |
| | Q11 cyclo-C ₄ H ₇ | Q33 | 2-CH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q12 cyclo-C ₅ H ₉ | Q34 | 3-CH ₃ -C ₆ H ₄ |
| 55 | Q13 cyclo-C ₆ H ₁₁ | Q35 | 4-CH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q14 cyclo-C ₇ H ₁₃ | Q36 | 2-CF ₃ -C ₆ H ₄ |

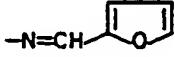
| | Verb. | R ¹ | Verb. | R ¹ |
|----|-------|---|-------|---|
| | Nr. | | Nr. | |
| 5 | Q15 | cyclo-C ₈ H ₁₅ | Q37 | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q16 | CF ₃ | Q38 | 4-CF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q17 | CH ₂ OCH ₃ | Q39 | 2-OCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| 10 | Q18 | CH(CH ₃)OCH ₃ | Q40 | 3-OCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q19 | CH(CH ₃)CH ₂ OCH ₃ | Q41 | 4-OCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q20 | CH ₂ OC ₂ H ₅ | Q42 | 4-OCF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | Q21 | Tetrahydrofur-2-yl | Q43 | 4-SCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| 15 | Q22 | Tetrahydrofur-2-yl | Q44 | 4-SCF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | | | Q45 | 4-NO ₂ -C ₆ H ₄ |
| | | | Q46 | 4-CN-C ₆ H ₄ |
| | Q23 | Tetrahydrofur-2-yl | | |
| | Q47 | neo-C ₅ H ₁₁ | Q56 | |
| 20 | Q48 | CH ₃ O | | |
| | Q49 | C ₂ H ₅ O | | |
| | Q50 | C ₆ H ₅ -CH ₂ | Q57 | |
| 25 | Q51 | 4-F-C ₆ H ₄ -CH ₂ | | |
| | Q51 | 4-CH ₃ -C ₆ H ₄ -CH ₂ - | | |
| | Q52 | | Q58 | |
| 30 | Q53 | | Q59 | Pyrid-2-yl |
| | Q54 | | Q60 | Pyrid-3-yl |
| 35 | Q55 | | Q61 | Pyrid-4-yl |
| | | | Q62 | 2,6-F ₂ -C ₆ H ₃ |
| 40 | | | | |
| 45 | | | | |

50

55

| | Verb. | R ⁵ |
|----|-------|--|
| | Nr. | |
| 5 | | |
| | M1 | H |
| | M2 | CH ₃ |
| 10 | M3 | C ₂ H ₅ |
| | M4 | n-C ₃ H ₇ |
| | M5 | i-C ₃ H ₇ |
| | M6 | n-C ₄ H ₉ |
| 15 | M7 | s-C ₄ H ₉ |
| | M8 | t-C ₄ H ₉ |
| | M9 | CH(CH ₃)C ₆ H ₁₃ |
| | M10 | CH ₂ CH ₂ OCH ₃ |
| 20 | M11 | CH ₂ CH ₂ OCH ₂ H ₅ |
| | M12 | Succinimido |
| | M13 | Li [⊕] |
| | M14 | Na [⊕] |
| 25 | M15 | K [⊕] |
| | M16 | NH ₄ [⊕] |
| | M17 | H ₃ N [⊕] i-C ₃ H ₇ |
| | M18 | H ₂ N [⊕] (i-C ₃ H ₇) ₂ |
| 30 | M19 | H ₃ N [⊕] CH ₂ CH ₂ OH |
| | M20 | CH ₂ CH=CH ₂ |
| | M21 | CH ₂ -C(CH ₃)=CH ₂ |
| | M22 | CH ₂ -C(C ₁)=CH ₂ |
| 35 | M23 | CH ₂ -C≡CH |
| | M24 | CH ₂ -C≡C-CH ₂ OH |
| | M25 | -N=C(CH ₃) ₂ |
| | M26 | -N=C(C ₂ H ₅) ₂ |
| 40 | M27 | CH ₂ -CH ₂ -N(CH ₃) ₂ |
| | M28 | CH ₂ -CH ₂ -N(C ₂ H ₅) ₂ |
| | M29 | CH ₂ -CH ₂ N [⊕] (CH ₃) ₃ I [⊖] |
| | M30 | CH ₂ -CF ₃ |
| 45 | M31 | Phenyl |
| | M32 | Phenylethyl |
| | M33 | CH ₂ -CH ₂ -Si(CH ₃) ₃ |
| | M34 | CH ₂ -CH ₂ -ON=C(CH ₃) ₂ |
| 50 | M35 | CH ₂ -PO(OC ₂ H ₅) ₂ |
| | M36 | CH(CH ₃)CH(OCH ₃) ₂ |
| | M37 | CH ₂ -CON(C ₂ H ₅) ₂ |
| | M38 | N(C ₂ H ₅) ₂ |
| 55 | M39 | CH ₂ -OCH ₂ -C ₆ H ₅ |

| Verb. | R5 |
|-------|--|
| Nr. | |
| 5 | |
| M40 | $\text{CH}(\text{COOCH}_3)_2$ |
| M41 | $-\text{N}=\text{C}(\text{cyclo-C}_3\text{H}_5)_2$ |
| 10 | |
| M42 | $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{N}=\text{C} \\ \\ \text{C}_2\text{H}_5 \end{array}$ |
| 15 | |
| M43 | Cyclohexanimino |
| M44 | Cyclooctanimino |
| M45 | $\text{CH}_2\text{--CH}_2\text{--Cl}$ |
| M46 | $\text{CH}_2=\text{CH}_2\text{--CN}$ |
| 20 | |
| M47 | $\text{CH}_2\text{--CCl}_3$ |
| M48 | Pyrid-3-ylmethyl |
| M49 | Thien-2-yl-methyl |
| 25 | |
| M50 | $\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{--CH} \text{---} \text{O} \text{---} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_2\text{---O} \text{---} \text{X} \end{array}$ |
| 30 | |
| M51 | $\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{---CH} \text{---} \text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{---OH} \end{array}$ |
| 35 | |
| M52 | $\begin{array}{c} -\text{CH}_2\text{---CH} \text{---} \text{O} \\ \\ \text{CH}_2\text{---O} \text{---} \text{O} \end{array}$ |
| M53 | $-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{COOCH}_3$ |
| 40 | |
| M54 | cyclo- C_6H_{11} |
| M55 | $-\text{CH}_2\text{---OCH}_2\text{---C}_6\text{H}_5$ |
| M56 | Tetrahydropyran-2-yl |
| M57 | Tetrahydrofuran-2-yl |
| M58 | (4-Brom-benzoyl)methyl |
| M59 | (4-Methoxybenzoyl)methyl |
| M60 | $-\text{CH}(\text{COOCH}_3)_2$ |
| M61 | Phthalimidomethyl |
| M62 | Fur-2-ylmethyl |
| M63 | Tetrahydrofuran-2-yl-methyl |
| M64 | Pyrid-2-ylmethyl |
| M65 | Pyrid-4-ylmethyl |
| M66 | Pyrid-3-yl-methyl |
| M67 | Thien-2-yl-methyl |
| M68 | $-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{COOCH}_3$ |
| M69 | Piperidino |
| 55 | |
| M70 | Phthalimido |

| | Verb. | R ⁵ |
|----|-------|--|
| | Nr. | |
| 5 | | |
| | M71 |  |
| 10 | M72 | -N=CH-C ₆ H ₅ |
| | M73 |  |
| 15 | M74 | 2-NO ₂ -4-F-C ₆ H ₃ |
| | M75 | 3,5-(CF ₃) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | M76 | CH ₂ -CH ₂ -S-CH ₃ |
| | M77 | 4-NHCOCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| 20 | M78 | 2,4-Dichlorbenzyl |

| | Verb. | R ³ | Verb. | R ³ |
|----|-------|-------------------------------------|-------|---|
| | Nr. | | Nr. | |
| 25 | P1 | H | P12 | CH ₂ OC ₂ H ₅ |
| | P2 | CH ₃ | P13 | CH ₂ CH ₂ OCH ₃ |
| 30 | P3 | C ₂ H ₅ | P14 | CH ₂ SCH ₃ |
| | P4 | n-C ₃ H ₇ | P15 | CH ₂ SC ₂ H ₅ |
| | P5 | i-C ₃ H ₇ | P16 | CH ₂ CH ₂ SCH ₃ |
| | P6 | n-C ₄ H ₉ | P17 | CH ₂ -CH ₂ -N(CH ₃) ₂ |
| 35 | P7 | s-C ₄ H ₉ | P18 | CH ₂ CH ₂ -N(C ₂ H ₅) ₂ |
| | P8 | t-C ₄ H ₉ | P19 | cyclo-C ₃ H ₅ |
| | P9 | CH ₂ -CH ₂ OH | P20 | cyclo-C ₆ H ₁₁ |
| | P10 | CH ₂ -CH ₂ Cl | P21 | 1-Methyl-cyclo-C ₆ H ₁₀ |
| 40 | P11 | CH ₂ OCH ₃ | | |

45

50

55

| | Verb. | R ⁴ | | Verb. | R ⁴ |
|----|-------|--|--|-------|--|
| | Nr. | | | Nr. | |
| 5 | L1 | -H | | L21 | -CH(C ₂ H ₅)C ₅ H ₁₁ |
| | L2 | CH ₃ | | L22 | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ C(CH ₃) ₃ |
| | L3 | C ₂ H ₅ | | L23 | cyclo-C ₃ H ₅ |
| | L4 | n-C ₃ H ₇ | | L24 | cyclo-C ₄ H ₇ |
| 10 | L5 | i-C ₃ H ₇ | | L25 | cyclo-C ₅ H ₉ |
| | L6 | n-C ₄ H ₉ | | L26 | cyclo-C ₆ H ₁₁ |
| | L7 | i-C ₄ H ₉ | | L27 | cyclo-C ₇ H ₁₃ |
| | L8 | sec-C ₄ H ₉ | | L28 | cyclo-C ₈ H ₁₅ |
| 15 | L9 | tert.-C ₄ H ₉ | | L29 | 1-Methylcyclohexyl |
| | L10 | n-C ₅ H ₁₁ | | L30 | 1-Ethylcyclohexyl |
| | L11 | -CH(CH ₃)C ₃ H ₇ | | L31 | 3,5-Dimethylcyclohexyl |
| | L12 | -CH(C ₂ H ₅)C ₂ H ₅ | | L32 | 3-Trifluormethylcyclohexyl |
| 20 | L13 | n-C ₆ H ₁₃ | | L33 | Tetrahydropyran-4-yl |
| | L14 | -CH(CH ₃)C ₄ H ₉ | | L34 | 4-Methyl-tetrahydropyran |
| | L15 | -CH(C ₂ H ₅)C ₃ H ₇ | | | |
| | L16 | n-C ₇ H ₁₅ | | | |
| 25 | L17 | -CH(CH ₃)C ₅ H ₁₁ | | | |
| | L18 | -CH(C ₂ H ₅)C ₄ H ₉ | | | |
| | L19 | n-C ₈ H ₁₇ | | | |
| | L20 | -CH(CH ₃)C ₆ H ₁₃ | | | |

30

35

40

45

50

55

| | Verb. | R ⁴ | | Verb. | R ⁴ |
|----|-------|---|------|---|----------------|
| | Nr. | | | Nr. | |
| 5 | L35 | 4-Methyl-tetrahydropyran- | L72 | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ OCH ₃ | |
| | | 4-yl | L73 | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂ | |
| | L36 | -CH ₂ -CH=CH ₂ | L74 | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ N(C ₂ H ₅) ₂ | |
| | L37 | -CH(CH ₃)CH=CH ₂ | L75 | 2-CH ₃ -C ₆ H ₄ | |
| | L38 | -C(CH ₃) ₂ CH=CH ₂ | L76 | 3-CH ₃ -C ₆ H ₄ | |
| 10 | L39 | -C(CH ₃ , C ₂ H ₅)CH=CH ₂ | L77 | 4-CH ₃ -C ₆ H ₄ | |
| | L40 | -C(CH ₃) ₂ -C ₂ H ₅ | L78 | 2-C ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | |
| | L41 | -C(CH ₃ , C ₂ H ₅)C ₂ H ₅ | L79 | 3-C ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | |
| | L42 | -C(CH ₃) ₂ C ₃ H ₇ | L80 | 4-C ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | |
| 15 | L43 | -C(CH ₃) ₂ cycloC ₆ H ₁₁ | L81 | 3-tert.-C ₄ H ₉ -C ₆ H ₄ | |
| | L44 | -CH ₂ -C(CH ₃)=CH ₂ | L82 | 4-tert.-C ₄ H ₉ -C ₆ H ₄ | |
| | L45 | -CH ₂ CH=CHCH ₃ | L83 | 2, 3-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L46 | -CH(CH ₃)CH=CHCH ₃ | L84 | 2, 4-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| 20 | L47 | -C(CH ₃) ₂ CH=CHCH ₃ | L85 | 2, 5-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L48 | -CH ₂ C≡CH | L86 | 2, 6-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L49 | -CH(CH ₃)C≡CH | L87 | 3, 4-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L50 | -C(CH ₃) ₂ C≡CH | L88 | 3, 5-(CH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | |
| 25 | L51 | -C(CH ₃ , C ₂ H ₅)C≡CH | L89 | 2, 3, 4-(CH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | |
| | L52 | -C(C ₂ H ₅) ₂ C≡CH | L90 | 2, 3, 5-(CH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | |
| | L53 | -CH ₂ C≡CCH ₃ | L91 | 2, 4, 5-(CH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | |
| | L54 | -CH(CH ₃)C≡CCH ₃ | L92 | 2, 4, 6-(CH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | |
| 30 | L55 | -C(CH ₃) ₂ C≡CCH ₃ | L93 | 3, 4, 5-(CH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | |
| | L56 | -CH ₂ C ₆ H ₅ | L94 | 2-CF ₃ -C ₆ H ₄ | |
| | L57 | -CH(CH ₃)C ₆ H ₅ | L95 | 3-CF ₃ -C ₆ H ₄ | |
| | L58 | -C(CH ₃) ₂ C ₆ H ₅ | L96 | 4-CF ₃ -C ₆ H ₄ | |
| 35 | L59 | -CH ₂ CH ₂ C ₆ H ₅ | L97 | 2-F-C ₆ H ₄ | |
| | L60 | -CH ₂ CH ₂ SCH ₃ | L98 | 3-F-C ₆ H ₄ | |
| | L61 | -CH(CH ₃)CH ₂ SCH ₃ | L99 | 4-F-C ₆ H ₄ | |
| | L62 | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ SCH ₃ | L100 | 2-Cl-C ₆ H ₄ | |
| 40 | L63 | -CH ₂ CH ₂ CH ₂ SCH ₃ | L101 | 3-Cl-C ₆ H ₄ | |
| | L64 | -CH ₂ CH ₂ Cl | L102 | 4-Cl-C ₆ H ₄ | |
| | L65 | -CH(CH ₃)CH ₂ Cl | L103 | 2-Br-C ₆ H ₄ | |
| | L66 | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ Cl | L104 | 3-Br-C ₆ H ₄ | |
| 45 | L67 | -CH ₂ CH ₂ OCH ₃ | L105 | 4-Br-C ₆ H ₄ | |
| | L68 | -CH(CH ₃)CH ₂ OCH ₃ | L106 | 2, 3-F ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L69 | -C(CH ₃) ₂ CH ₂ OCH ₃ | L107 | 2, 4-F ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | L70 | -CH ₂ CH ₂ N(CH ₃) ₂ | L108 | 2, 5-F ₂ -C ₆ H ₃ | |
| 50 | L71 | -CH ₂ CH ₂ N(C ₂ H ₅) ₂ | L109 | 2, 6-F ₂ -C ₆ H ₃ | |
| | | | L110 | 2, 3-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | |

| | Verb. | R ⁴ | Verb. | R ⁴ |
|----|-------|---|-------|--|
| | Nr. | | Nr. | |
| 5 | L111 | 2, 4-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | L149 | 3-SCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | L112 | 2, 5-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | L150 | 4-SCH ₃ -C ₆ H ₄ |
| | L113 | 2, 6-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | L151 | 2-SC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ |
| | L114 | 3, 4-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | L152 | 3-SC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ |
| 10 | L115 | 3, 5-Cl ₂ -C ₆ H ₃ | L153 | 4-SC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ |
| | L116 | 2, 3, 4-Cl ₃ -C ₆ H ₂ | L154 | 2-S-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ |
| | L117 | 2, 3, 5-Cl ₃ -C ₆ H ₂ | L155 | 3-S-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ |
| | L118 | 2, 4, 6-Cl ₃ -C ₆ H ₂ | L156 | 4-S-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ |
| 15 | L119 | 3, 4, 5-Cl ₃ -C ₆ H ₂ | L157 | 2, 4-(SCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | L120 | 2-CN-C ₆ H ₄ | L158 | 2-SCF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | L121 | 3-CN-C ₆ H ₄ | L159 | 3-SCF ₃ -C ₆ H ₄ |
| | L122 | 4-CN-C ₆ H ₄ | L160 | 4-SCF ₃ -C ₆ H ₄ |
| 20 | L123 | 2-OCH ₃ -C ₆ H ₄ | L161 | 2-NO ₂ -C ₆ H ₄ |
| | L124 | 3-OCH ₃ -C ₆ H ₄ | L162 | 3-NO ₂ -C ₆ H ₄ |
| | L125 | 4-OCH ₃ -C ₆ H ₄ | L163 | 4-NO ₂ -C ₆ H ₄ |
| | L126 | 2-OC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | L164 | 2, 3-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| 25 | L127 | 3-OC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | L165 | 2, 4-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | L128 | 4-OC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ | L166 | 2, 5-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | L129 | 2-O-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L167 | 2, 6-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | L130 | 3-O-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L168 | 3, 4-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| 30 | L131 | 4-O-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L169 | 3, 5-(NO ₂) ₂ -C ₆ H ₃ |
| | L132 | 2-O-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L170 | 2-CHO-C ₆ H ₄ |
| | L133 | 3-O-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L171 | 3-CHO-C ₆ H ₄ |
| | L134 | 4-O-i-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ | L172 | 4-CHO-C ₆ H ₄ |
| 35 | L135 | 2, 3-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | L173 | 2-C ₂ H ₃ -C ₆ H ₄ O |
| | L136 | 2, 4-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | | |
| | L137 | 2, 5-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | L174 | 3-C ₂ H ₃ -C ₆ H ₄ O |
| | L138 | 2, 6-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | | |
| 40 | L139 | 3, 4-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | L175 | 4-C ₂ H ₃ -C ₆ H ₄ O |
| | L140 | 3, 5-(OCH ₃) ₂ -C ₆ H ₃ | | |
| | L141 | 3, 4, 5-(OCH ₃) ₃ -C ₆ H ₂ | | |
| | L142 | 2-OCF ₃ -C ₆ H ₄ | L176 | 2-CC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ O |
| 45 | L143 | 3-OCF ₃ -C ₆ H ₄ | | |
| | L144 | 4-OCF ₃ -C ₆ H ₄ | | |
| | L145 | 2-OCF ₂ CHF ₂ -C ₆ H ₄ | L177 | 3-CC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ O |
| | L146 | 3-OCF ₂ CHF ₂ -C ₆ H ₄ | | |
| 50 | L147 | 4-OCF ₃ CHF ₂ -C ₆ H ₄ | L178 | 4-CC ₂ H ₅ -C ₆ H ₄ O |
| | L148 | 2-SCH ₃ -C ₆ H ₄ | | |

| | Verb. | R ⁴ |
|----|-------|---|
| | Nr. | |
| 5 | L179 | 2-C-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ O |
| 10 | L180 | 3-C-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ O |
| 15 | L181 | 4-C-n-C ₃ H ₇ -C ₆ H ₄ O |
| 20 | L182 | 2-CCF ₃ -C ₆ H ₄ O |
| 25 | L183 | 3-CCF ₃ -C ₆ H ₄ O |
| 30 | L184 | 4-CCF ₃ -C ₆ H ₄ O |
| 35 | L185 | 1-Naphthyl |
| | L186 | 2-Naphthyl |
| | L187 | C ₆ H ₅ |
| | L188 | Piperidino |
| | L189 | Tetrahydrofur-3-yl |
| 35 | L190 | Thiazol-2-yl |
| | L191 | 5-Methyl-thiazol-2-yl |
| | L192 | 5-Ethyl-thiazol-2-yl |
| | L193 | 5-n-Propyl-thiazol-2-yl |
| 40 | L194 | 4-Methyl-5-carboxy-thiazol-2-yl |
| | L195 | Cyclopropylmethyl |

Die Verbindungen Ia bzw. die sie enthaltenden herbiziden Mittel können beispielsweise in Form von direkt versprühbaren Lösungen, Pulvern, Suspensionen, auch hochprozentigen wäßrigen, öligen oder sonstigen Suspensionen oder Dispersionen, Emulsionen, Öldispersionen, Pasten, Stäubemitteln, Streumitteln oder Granulaten durch Versprühen, Vernebeln, Verstäuben, Verstreuen oder Gießen angewendet werden. Die Anwendungsformen richten sich ganz nach den Verwendungszwecken; sie sollten in jedem Fall möglichst die feinste Verteilung der erfindungsgemäßen Wirkstoffe gewährleisten.

Die Verbindungen Ia eignen sich allgemein zur Herstellung von direkt versprühbaren Lösungen, Emulsionen, Pasten oder Öldispersionen aus Mineralölfractionen von mittlerem bis hohem Siedepunkt, wie Kerosin oder Dieselöl, ferner aus Kohlenteerölen sowie aus Ölen pflanzlichen oder tierischen Ursprungs, aus aliphatischen, cyclischen und aromatischen Kohlenwasserstoffen, z.B. Toluol, Xylol, Paraffin, Tetrahydronaphthalin, alkylierte Naphthaline oder deren Derivate, Methanol, Ethanol, Propanol, Butanol, Cyclohexanol, Cyclohexanon, Chlorbenzol, Isophoron, oder stark polare Lösungsmittel, wie N,N-Dimethylformamid, Dimethylsulfoxid, N-Methylpyrrolidon oder Wasser.

Wäßrige Anwendungsformen können aus Emulsionskonzentraten, Dispersionen, Pasten, netzbaren Pulvern oder wasserdispergierbaren Granulaten durch Zusatz von Wasser bereitet werden. Zur Herstellung

von Emulsionen, Pasten oder Öldispersionen können die Substrate als solche oder in einem Öl oder Lösungsmittel gelöst, mittels Netz-, Haft-, Dispergier- oder Emulgiermittel in Wasser homogenisiert werden. Es können aber auch aus wirksamer Substanz Netz-, Haft-, Dispergier- oder Emulgiermittel und eventuell Lösungsmittel oder Öl bestehende Konzentrate hergestellt werden, die zur Verdünnung mit Wasser geeignet sind.

Als oberflächenaktive Stoffe kommen die Alkali-, Erdalkali- und Ammoniumsalze von aromatischen Sulfonsäuren, z.B. Lignin-, Phenol-, Naphthalin- und Dibutylnaphthalinsulfonsäure, sowie von Fettsäuren, Alkyl- und Alkylarylsulfonaten, Alkyl-, Laurylether- und Fettalkoholsulfaten, sowie Salze sulfatisierter Hexa-, Hepta- und Octadecanolen, sowie von Fettalkoholglykolether, Kondensationsprodukte von sulfonierte

10 Naphthalin und seiner Derivate mit Formaldehyd, Kondensationsprodukte des Naphthalins bzw. der Naphthalinsulfonsäuren mit Phenol und Formaldehyd, Polyoxyethylenoctylphenolether, ethoxyliertes Isooctyl, Octyl- oder Nonylphenol, Alkylphenol-, Tributylphenylpolyglykolether, Alkylarylpolyetheralkohole, Isotridecylalkohol, Fettalkoholethylenoxid-Kondensate, ethoxyliertes Ricinusöl, Polyoxyethylenalkylether, ethoxyliertes Polyoxypropylen, Laurylalkoholpolyglykoletheracetat, Sorbitester, Lignin, Sulfitablaugen oder Methylcellulose in Betracht.

15 Pulver-, Streu- und Stäubemittel können durch Mischen oder gemeinsames Vermahlen der wirksamen Substanzen mit einem festen Trägerstoff hergestellt werden.

20 Granulat, z.B. Umhüllungs-, Imprägnierungs- und Homogengranulat können durch Bindung der Wirkstoffe an feste Trägerstoffe hergestellt werden. Feste Trägerstoffe sind Mineraleerde wie Silicagel, Kieseläuren, Kieselgele, Silikate, Talcum, Kaolin, Kalkstein, Kalk, Kreide, Bolus, Löß, Ton, Dolomit, Diatomeenerde, Calcium- und Magnesiumsulfat, Magnesiumoxid, gemahlene Kunststoffe, Düngemittel, wie Ammoniumsulfat, Ammoniumphosphat, Ammoniumnitrat, Harnstoffe und pflanzliche Produkte, wie Getreide- mehl, Baumrinden-, Holz- und Nußschalenmehl, Cellulosepulver oder andere feste Trägerstoffe.

25 Beispiele für solche Zubereitungen sind:

I. Man vermischt 90 Gew.-Teile der Verbindung Nr. 1006 mit 10 Gew.-Teilen N-Methyl- α -pyrrolidon und erhält eine Lösung, die zur Anwendung in Form kleinstter Tropfen geeignet ist.

II. 20 Gew.-Teile der Verbindung Nr. 1006 werden in einer Mischung gelöst, die aus 80 Gew.-Teilen Xylool, 10 Gew.-Teilen des Anlagerungsproduktes von 8 bis 10 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ölsäure-N-monoethanolamid, 5 Gew.-Teilen Calciumsalz der Dodecylbenzolsulfonsäure und 5 Gew.-Teilen des Anlagerungsproduktes und 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ricinusöl besteht. Durch Ausgießen und feines Verteilen der Lösung in Wasser erhält man eine wässrige Dispersion.

30 III. 20 Gew.-Teile der Verbindung Nr. 1022 werden in einer Mischung gelöst, die aus 40 Gew.-Teilen Cyclohexanon, 30 Gew.-Teilen Isobutanol, 20 Gew.-Teilen des Anlagerungsproduktes von 7 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Isooctylphenol und 10 Gewichtsteilen des Anlagerungsproduktes von 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ricinusöl besteht. Durch Eingießen und feines Verteilen der Lösung in Wasser erhält man eine wässrige Dispersion, die 0,02 Gew.% des Wirkstoffs enthält.

35 IV. 20 Gew.-Teile der Verbindung Nr. 1049 werden in einer Mischung gelöst, die aus 25 Gew.-Teilen Cyclohexanol, 65 Gew.-Teilen einer Mineralölfraction vom Siedepunkt 210 bis 280 °C und 10 Gew.-Teilen des Anlagerungsproduktes von 40 Mol Ethylenoxid an 1 Mol Ricinusöl besteht. Durch Eingießen und feines Verteilen der Lösung in Wasser erhält man eine wässrige Dispersion, die 0,02 Gew.% des Wirkstoffs enthält.

40 V. 20 Gew.-Teile des Wirkstoffs Nr. 3038 werden mit 3 Gew.-Teilen des Natriumsalzes der Diisobutylnaphthalin- α -sulfonsäure, 17 Gew.-Teilen des Natriumsalzes einer Ligninsulfonsäure aus einer Sulfitablauge und 60 Gew.-Teilen pulverförmigem Kieseläuregel gut vermischt und in einer Hammermühle vermahlen. Durch feines Verteilen der Mischung in 20 000 Gew.-Teilen Wasser erhält man eine Spritzbrühe, die 0,1 Gew.% des Wirkstoffs enthält.

45 VI. 3 Gew.-Teile der Verbindung Nr. 1075 werden mit 97 Gew.-Teilen feinteiligem Kaolin innig vermischt. Man erhält auf diese Weise ein Stäubemittel, das 3 Gew.% des Wirkstoffs enthält.

VII. 30 Gew.-Teile des Wirkstoffs Nr. 1220 werden mit einer Mischung aus 92 Gew.-Teilen pulverförmigem Kieseläuregel und 8 Gew.-Teilen Paraffinöl, das auf die Oberfläche dieses Kieseläuregels gesprührt wurde, innig vermischt. Man erhält auf diese Weise eine Aufbereitung des Wirkstoffs mit guter Haftfähigkeit.

50 VIII. 20 Gew.-Teile des Wirkstoffs Nr. 1026 werden mit 2 Gew.-Teilen Calciumsalz der Dodecylbenzolsulfonsäure, 8 Gew.-Teilen Fettalkoholpolyglykolether, 2 Gew.-Teilen Natriumsalz eines Phenol-Formaldehyd-Kondensats und 68 Gew.-Teilen eines paraffinischen Mineralöls innig vermischt. Man erhält eine stabile ölige Dispersion.

55 Die Formulierungen enthalten zwischen 0,1 und 95 Gew.%, vorzugsweise zwischen 0,5 und 90 Gew.%, Wirkstoff.

Die Applikation der herbiziden Mittel bzw. der Wirkstoffe kann im Vorauflauf- oder vorzugsweise im Nachauflaufverfahren erfolgen. Sind die Wirkstoffe für gewisse Kulturpflanzen weniger verträglich, so können Ausbringungstechniken angewandt werden, bei welchen die herbiziden Mittel mit Hilfe der Spritzgeräte so gespritzt werden, daß die Blätter der empfindlichen Kulturpflanzen nach Möglichkeit nicht getroffen werden, während die Wirkstoffe auf die Blätter darunter wachsender unerwünschter Pflanzen oder die unbedeckte Bodenfläche gelangen (post-directed, lay-by).

5 Die Aufwandmengen an Wirkstoff betragen je nach Bekämpfungsziel, Jahreszeit, Zielpflanzen und Wachstumsstadium 0,001 bis 5, vorzugsweise 0,01 bis 1 kg/ha.

10 In Anbetracht des erfaßbaren Wirkungsspektrums zur Bekämpfung der unerwünschten Pflanzen der Verträglichkeit für Kulturpflanzen oder der erwünschten Beeinflussung des Wachstums derselben sowie angesichts der Vielfalt der Applikationsmethoden können die Verbindungen der Formel Ia sowie die sie enthaltenden herbiziden Mittel in einer großen Zahl von Kulturpflanzen eingesetzt werden.

In Betracht kommen beispielsweise folgende Kulturen:

15

20

25

30

35

40

45

50

55

| | Botanischer Name | Deutscher Name |
|----|---|-----------------------|
| | Allium cepa | Küchenzwiebel |
| | Ananas comosus | Ananas |
| 5 | Arachis hypogaea | Erdnuß |
| | Asparagus officinalis | Spargel |
| | Avena sativa | Hafer |
| | Beta vulgaris spp. altissima | Zuckerrübe |
| 10 | Beta vulgaris spp. rapa | Futterrübe |
| | Beta vulgaris spp. esculenta | Rote Rübe |
| | Brassica napus var. napus | Raps |
| | Brassica napus var. napobrassica | Kohlrübe |
| 15 | Brassica napus var. rapa | Weiße Rübe |
| | Brassica rapa var. silvestris | Rübsen |
| | Camellia sinensis | Teestrauch |
| | Carthamus tinctorius | Saflor - Färberdistel |
| 20 | Carya illinoinensis | Pekannußbaum |
| | Citrus limon | Zitrone |
| | Citrus maxima | Pampelmuse |
| | Citrus reticulata | Mandarine |
| 25 | Citrus sinensis | Apfelsine, Orange |
| | Coffea arabica (Coffea canephora, Coffea liberica) | Kaffee |
| | Cucumis melo | Melone |
| 30 | Cucumis sativus | Gurke |
| | Cynodon dactylon | Bermudagrass |
| | Elaeis guineensis | Ölpalme |
| | Fragaria vesca | Erdbeere |
| 35 | Glycine max | Sojabohne |
| | Gossypium hirsutum (Gossypium arboreum, Gossypium herbaceum, Gossypium vitifolium) | Baumwolle |
| | Helianthus annuus | Sonnenblume |
| 40 | Helianthus tuberosus | Topinambur |
| | Hevea brasiliensis | Parakautschukbaum |
| | Hordeum vulgare | Gerste |
| | Humulus lupulus | Hopfen |
| 45 | Ipomoea batatas | Süßkartoffeln |
| | Juglans regia | Walnußbaum |

| | Botanischer Name | Deutscher Name |
|----|--|----------------------------|
| | <i>Lactua sativa</i> | Kopfsalat |
| 5 | <i>Lens culinaris</i> | Linse |
| | <i>Linum usitatissimum</i> | Faserlein |
| | <i>Lycopersicon lycopersicum</i> | Tomate |
| | <i>Malus spp.</i> | Apfel |
| 10 | <i>Manihot esculenta</i> | Maniok |
| | <i>Medicago sativa</i> | Luzerne |
| | <i>Mentha piperita</i> | Pfefferminze |
| | <i>Musa spp.</i> | Obst- und Mehlbanane |
| 15 | <i>Nicotiana tabacum (N. rustica)</i> | Tabak |
| | <i>Olea europaea</i> | Ölbaum |
| | <i>Oryza sativa</i> | Reis |
| | <i>Panicum miliaceum</i> | Rispenhirse |
| 20 | <i>Phaseolus lunatus</i> | Mondbohne |
| | <i>Phaseolus mungo</i> | Erdbohne |
| | <i>Phaseolus vulgaris</i> | Buschbohnen |
| | <i>Pennisetum glaucum</i> | Perl- oder Rohrkolbenhirse |
| 25 | <i>Petroselinum crispum spp. tuberosum</i> | Wurzelpetersilie |
| | <i>Picea abies</i> | Rotfichte |
| | <i>Abies alba</i> | Weißtanne |
| | <i>Pinus spp.</i> | Kiefer |
| 30 | <i>Pisum sativum</i> | Gartenerbse |
| | <i>Prunus avium</i> | Süßkirsche |
| | <i>Prunus domestica</i> | Pflaume |
| | <i>Prunus dulcis</i> | Mandelbaum |
| 35 | <i>Prunus persica</i> | Pfirsich |
| | <i>Pyrus communis</i> | Birne |
| | <i>Ribes sylvestre</i> | Rote Johannisbeere |
| | <i>Ribes uva-crispa</i> | Stachelbeere |
| 40 | <i>Ricinus communis</i> | Rizinus |
| | <i>Saccharum officinarum</i> | Zuckerrohr |
| | <i>Secale cereale</i> | Roggen |
| | <i>Sesamum indicum</i> | Sesam |
| 45 | <i>Solanum tuberosum</i> | Kartoffel |
| | <i>Sorghum bicolor (s. vulgare)</i> | Mohrenhirse |
| | <i>Sorghum dochna</i> | Zuckerhirse |
| | <i>Spinacia oleracea</i> | Spinat |
| | <i>Theobroma cacao</i> | Kakaobaum |
| 50 | <i>Trifolium pratense</i> | Rotklee |
| | <i>Triticum aestivum</i> | Weizen |
| | <i>Triticum durum</i> | Hartweizen |
| 55 | <i>Vaccinium corymbosum</i> | Kulturheidelbeere |
| | <i>Vaccinium vitis-idaea</i> | Preißelbeere |

| | <u>Botanischer Name</u> | <u>Deutscher Name</u> |
|---|--|-----------------------|
| 5 | <i>Vicia faba</i> | Pferdebohnen |
| | <i>Vigna sinensis</i> (v. <i>unguiculata</i>) | Kuhbohne |
| | <i>Vitis vinifera</i> | Weinrebe |
| | <i>Zea mays</i> | Mais |

10 Zur Verbreiterung des Wirkungsspektrums und zur Erzielung synergistischer Effekte können die Isoxazol-(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel Ia mit zahlreichen Vertretern anderer herbizider oder wachstumsregulierender Wirkstoffgruppen gemischt und gemeinsam ausgebracht werden. Beispielsweise kommen als Mischungspartner Diazine, 4H-3,1-Benzozinderivate, Benzothiadiazinone, 2,6-Dinitroaniline, N-
15 Phenylcarbamate, Thiolcarbamate, Halogencarbonsäuren, Triazine, Amide, Harnstoffe, Diphenylether, Triazine, Uracile, Benzofuranderivate, Cyclohexan-1,3-dionderivate, Chinolincarbonsäuren, Sulfonylharnstoffe, Imidazolinone, (Hetero)Aryloxyphenoxypropionsäuren, deren Salze, Ester und Amide und andere Wirkstoffe in Betracht.

20 Außerdem kann es von Nutzen sein, die Verbindungen der Formel Ia allein oder in Kombination mit anderen Herbiziden auch noch mit weiteren Pflanzenschutzmitteln gemischt gemeinsam zubringen, beispielsweise mit Mitteln zur Bekämpfung von Schädlingen oder phytopatogenen Pilzen bzw. Bakterien. Von Interesse ist ferner die Mischbarkeit mit Mineralsalzlösungen, welche zur Behebung von Ernährungs- und Spurenelementmängeln eingesetzt werden. Es können auch nichtphytotoxische Öle und Ölkonzentrate hergestellt werden.

25

Anwendungsbeispiele

30 Die Wirkung der Isoxazol-(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel Ia auf das Pflanzenwachstum lässt sich durch Gewächshausversuche zeigen:

Als Kulturgefäße dienen Plastikblumentöpfe mit 300 cm³ Inhalt und lehmigem Sand mit etwa 3 % Humus als Substrat. Die Samen der Testpflanzen werden nach Arten getrennt flach eingesät.

35 Bei Vorauflaufbehandlung werden die aufbereiteten Wirkstoffe unmittelbar danach auf die Erdoberfläche aufgebracht. Sie werden hierzu in Wasser als Verteilungsmittel suspendiert oder emulgiert und mittels fein verteilender Düsen gespritzt. Nach dem Aufbringen der Mittel werden die Gefäße leicht beregnet, um Keimung und Wachstum in Gang zu bringen. Danach deckt man die Gefäße mit durchsichtigen Plastikhülsen ab, bis die Pflanzen auflaufen. Diese Abdeckung bewirkt ein gleichmäßiges Keimen der Testpflanzen, sofern dies nicht durch die Wirkstoffe beeinträchtigt wird.

40 Zum Zwecke der Nachauflaufbehandlung werden entweder direkt gesäte oder in den gleichen Gefäßen aufgewachsene Pflanzen ausgewählt oder die Pflanzen werden erst als Keimpflanzen getrennt angezogen und einige Tage vor der Behandlung in die Versuchsgläser verpflanzt.

45 Je nach Wuchsform werden die Testpflanzen bei einer Wuchshöhe von 3 bis 15 cm dann mit den in Wasser als Verteilungsmittel suspendierten oder emulgierten Wirkstoffen, die durch fein verteilende Düsen gespritzt werden, behandelt. Die Aufwandmenge für die Nachauflaufbehandlung beträgt 1,0 und 3,0 kg/ha a.S.

50 Die Versuchsgläser werden dann im Gewächshaus aufgestellt, wobei für wärmeliebende Arten wärmeren Bereiche (20 bis 35 °C) und für solche gemäßigter Klimate 10 bis 20 °C bevorzugt werden. Die Versuchsperiode erstreckt sich über 2 bis 4 Wochen. Während dieser Zeit werden die Pflanzen gepflegt, und ihre Reaktion auf die einzelnen Behandlungen wird ausgewertet.

55 Bewertet wird nach einer Skala von 0 bis 100. Dabei bedeutet 100 kein Aufgang der Pflanzen bzw. völlige Zerstörung zumindest der oberirdischen Teile und 0 keine Schädigung oder normaler Wachstumsverlauf.

Die in den Gewächshausversuchen verwendeten Pflanzen setzen sich aus folgenden Arten zusammen:

55

| | Lateinischer Name | Deutscher Name |
|----|--------------------------|-------------------------|
| 5 | Abutilon theophrasti | Chinesischer Hanf |
| | Centaurea cyanus | Kornblume |
| | Chenopodium album | Wei er G  nsefu  |
| | Chrysanthemum coronarium | Kranenwucherblume |
| | Echinochloa crus-galli | H  hnerhirse |
| | Galium aparine | Klettenlabkraut |
| 10 | Ipomoea ssp. | Prunkwindearten |
| | Lolium multiflorum | Ital. Rayras |
| | Mentha piperita | Pfefferminze |
| | Mercurialis annua | einj. Bingelkraut |
| | Solanum nigrum | Schwarzer Nachtschatten |
| | Triticum aestivum | Sommerweizen |
| 15 | Viola spp. | Stiefm  tterchen |
| | Zea mays | Mais |

Der beispielhaft ausgew  hlte Wirkstoff Nr. 1006 bek  mpft unerw  nschte Pflanzen im Vorauflaufverfahren bei einer Aufwandmenge von 3,0 kg/ha sehr gut.

Bei Nachauflaufanwendung zeigen u.a. die Wirkstoffe Nr. 1004, 1014, 3018, 1026, 1006, 1049 und 1022 bei 1 bis 3 kg/ha Aufwandmenge herbizide Wirkung gegen ein breites Spektrum unerw  nschter Pflanzen. Außerdem zeigen die Verbindungen Nr. 1075 und 3038 eine sehr gute herbizide Wirkung an breitbl  ttrigen Pflanzen bei gleichzeitiger Selektivit  t in Mais. Die Verbindung Nr. 1211 zeigt neben ausgezeichneter herbizider Aktivit  t Selektivit  t in Weizen.

25

Anspr  che

1. Isoxazol(Isothiazol)-5-carbons  ureamide der Formel

30



35

in der

X Sauerstoff oder Schwefel,

R¹ Wasserstoff,

40 gegebenenfalls durch C₁-C₃-Alkoxy, C₁-C₃-Halogenalkoxy, Halogen, Cyano oder Phenyl, das durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Halogenalkylthio, Cyano oder Nitro substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy,

gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl oder Halogen substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl,

45 einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgew  hlt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, der durch C₁-C₄-Alkyl, Carboxyl oder C₁-C₄-Alkoxy carbonyl substituiert sein kann,

oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,

50 R² Formyl, 4,5-Dihydro-oxazol-2-yl oder einen Rest der Formel COYR⁵ oder CONR⁶R⁷,

wobei

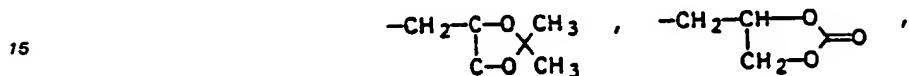
Y f  r Sauerstoff oder Schwefel,

R⁵ f  r Wasserstoff,

C₁-C₈-Alkyl, das durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxy, Halogen, Cyano, Hydroxy, Trimethylsilyl,

55 C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylamino, C₁-C₄-Dialkylamino, C₁-C₄-Alkylsulfinyl, C₁-C₄-Alkylsulfonyl, Carboxyl, C₁-C₄-Alkoxy carbonyl, C₁-C₄-Dialkylaminocarbonyl, C₁-C₄-Dialkoxyphosphonyl, Alkaniminoxy, Benzyloxy, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₃-Alkoxy oder Halogen substituiertes Benzoyl oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,

durch Thienyl, Furyl, Tetrahydrofuryl, Phthalimido oder Pyridyl substituiert sein kann,
gegebenenfalls durch Phenyl, das durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro
oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C₃-C₈-Alkenyl,
C₃-C₆-Halogenalkenyl,
5 gegebenenfalls durch Hydroxy oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₈-Alkinyl,
C₃-C₆-Cycloalkyl,
C₅-C₆-Cycloalkenyl,
gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkoxy-
carbonyl oder Acylamino substituiertes Phenyl,
10 einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der
Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, oder einen Benzotriazolrest
C₆-C₇-Cycloalkanimino, Phthalimido, Succinimido, für die Reste



-CH₂-CH(OH)-CH₂(OH),
20 für ein Äquivalent eines Kations aus der Gruppe der Alkali-, Erdalkalimetalle, Mangan, Kupfer, Eisen,
Ammonium und substituiertes Ammonium oder für den Rest



wobei R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander C₁-C₄-Alkyl, C₂-C₆-Alkoxyalkyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, Phenyl, Furyl
oder zusammen eine Methylenkette der Formel -(CH₂)_m- mit m = 4 bis 7 Kettengliedern bedeuten und R⁹
30 zusätzlich Wasserstoff bedeutet,
R⁶ für Wasserstoff, C₁-C₈-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl und
R⁷ für Wasserstoff oder C₁-C₈-Alkyl stehen oder wobei
R⁶ und R⁷ eine Methylenkette mit 4 oder 5 Gliedern bilden,
R³ Wasserstoff,
35 gegebenenfalls durch Hydroxy, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Dialkylamino substituiertes C₁-C₈-Alkyl
oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, Halogen oder C₁-C₄-Halogenalkyl substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl
und
R⁴ Wasserstoff, Hydroxyl, C₁-C₄-Alkoxy,
40 gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Dialkylamino, Halogen,
C₃-C₆-Cycloalkyl oder Phenyl, das durch Halogen, Cyano, Nitro, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-
Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Halogenalkylthio substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl,
gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₁₀-Alkenyl oder C₃-C₁₀-Alkinyl,
45 gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-
Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl,
C₁-C₄-Dialkylamino,
einen gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl oder Halogen substituierten 3- bis 6-gliedrigen
heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel
50 und gegebenenfalls durch Methyl substituierter Stickstoff, Naphthyl,
oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-
Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro, Cyano, Formyl, C₁-C₆-Alkanoyl oder C₁-C₆-Halogenalka-
noyl substituiertes Phenyl bedeuten
oder
55 R³ und R⁴ gemeinsam einen Rest der Struktur -(CH₂)_n-Y_p-(CH₂)_q-, wobei n und q 1, 2 oder 3, p 0
oder 1 und Y Sauerstoff, Schwefel oder N-Methyl bedeuten, oder den Rest der Formel
-(CH₂)₃-CO-
bilden,

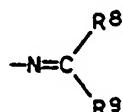
sowie deren umweltverträglichen Salze

mit der Maßgabe, daß X Schwefel ist, wenn R¹ CH₃, R² COOH oder COOC₂H₅ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten, und daß X Sauerstoff ist, wenn R¹ Wasserstoff, R² COOH oder CONH₂ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten.

5 2. Isoxazol(Isothioazol)-5-carbonsäureamide der Formel I gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß R³ Wasserstoff bedeutet.

3. Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamide der Formel I gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß R¹ Wasserstoff oder C₁-C₄-Alkyl,

10 R² COYR⁵, wobei Y für Sauerstoff oder Schwefel und R⁵ für Wasserstoff, C₁-C₄-Alkyl, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder Halogen substituiertes Phenyl oder den Rest



20 stehen,

R³ Wasserstoff und

R⁴ C₁-C₄-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl bedeuten.

4. Isoxazol-5-carbonsäureamid der Formel I gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, daß R¹ n-Propyl, R² Propan-2-iminoxy carbonyl, R³ Wasserstoff und R⁴ tert.-Butyl bedeuten.

25 5. Herbizides Mittel, enthaltend ein Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamid der Formel



in der

X Sauerstoff oder Schwefel,

R¹ Wasserstoff,

35 gegebenenfalls durch C₁-C₃-Alkoxy, C₁-C₃-Halogenalkoxy, Halogen, Cyano oder Phenyl, das durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Halogenalkylthio, Cyano oder Nitro substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy,

40 gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl oder Halogen substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl,

einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, der durch C₁-C₄-Alkyl, Carboxyl oder C₁-C₄-Alkoxy carbonyl substituiert sein kann,

oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,

45 R² Formyl, 4,5-Dihydro-oxazol-2-yl oder einen Rest der Formel COYR⁵ oder CONR⁶R⁷ wobei

Y für Sauerstoff oder Schwefel,

R⁵ für Wasserstoff,

50 C₁-C₈-Alkyl, das durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxy, Halogen, Cyano, Hydroxy, Trimethylsilyl,

C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylamino, C₁-C₄-Dialkylamino, C₁-C₄-Alkylsulfinyl, C₁-C₄-Alkylsulfonyl, Carboxyl,

C₁-C₄-Alkoxy carbonyl, C₁-C₄-Dialkylaminocarbonyl, C₁-C₄-Dialkoxyphosphonyl, Alkaniminoxy, Benzyloxy, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₃-Alkoxy oder Halogen substituiertes Benzoyl oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,

55 durch Thienyl, Furyl, Tetrahydrofuryl, Phthalimido oder Pyridyl substituiert sein kann,

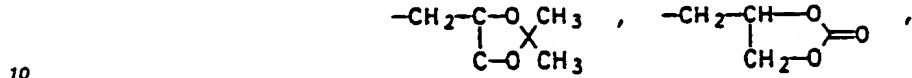
gegebenenfalls durch Phenyl, das durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C₃-C₈-Alkenyl,

C₃-C₆-Halogenalkenyl,

gegebenenfalls durch Hydroxy oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₈-Alkinyl,

C_3 - C_6 -Cycloalkyl,
 C_5 - C_6 -Cycloalkenyl, gegebenenfalls durch C_1 - C_4 -Alkyl, C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Halogenalkyl, Halogen, Nitro, Cyano, C_1 - C_4 -Alkoxy carbonyl oder Acylamino substituiertes Phenyl, einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der

5 Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, oder einen Benzotriazolrest,
 C_6 - C_7 -Cycloalkanlimino, Phthalimido, Succinimido, für die Reste



$-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2(\text{OH})$, für ein Äquivalent eines Kations aus der Gruppe der Alkali-, Erdalkalimetalle, Mangan, Kupfer, Eisen, Ammonium und substituiertes Ammonium oder für den Rest



20 wobei R^8 und R^9 unabhängig voneinander C_1 - C_4 -Alkyl, C_2 - C_6 -Alkoxyalkyl, C_3 - C_6 -Cycloalkyl, Phenyl, Furyl oder zusammen eine Methylenkette der Formel $-(\text{CH}_2)_m-$ mit $m = 4$ bis 7 Kettengliedern bedeuten und R^9 zusätzlich Wasserstoff bedeutet,
 R^6 für Wasserstoff, C_1 - C_8 -Alkyl oder C_3 - C_8 -Cycloalkyl und

25

 R^7 für Wasserstoff oder C_1 - C_8 -Alkyl stehen oder wobei
 R^6 und R^7 eine Methylenkette mit 4 oder 5 Gliedern bilden,
 R^3 Wasserstoff,
gegebenenfalls durch Hydroxy, Halogen, C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Alkylthio oder C_1 - C_4 -Dialkylamino substituiertes C_1 - C_8 -Alkyl

30

oder gegebenenfalls durch C_1 - C_4 -Alkyl, Halogen oder C_1 - C_4 -Halogenalkyl substituiertes C_3 - C_8 -Cycloalkyl und
 R^4 Wasserstoff, Hydroxyl,
gegebenenfalls durch C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Halogenalkoxy, C_1 - C_4 -Alkylthio, C_1 - C_4 -Dialkylamino, Halogen, C_3 - C_6 -Cycloalkyl oder Phenyl, das durch Halogen, Cyano, Nitro, C_1 - C_4 -Alkyl, C_1 - C_4 -Halogenalkyl, C_1 - C_4 -Alkoxy, C_1 - C_4 -Halogenalkoxy, C_1 - C_4 -Alkylthio oder C_1 - C_4 -Halogenalkylthio substituiert sein kann, substituiertes C_1 - C_{10} -Alkyl,
gegebenenfalls durch Halogen oder C_1 - C_4 -Alkoxy substituiertes C_3 - C_{10} -Alkenyl oder C_3 - C_{10} -Alkinyl,
gegebenenfalls durch C_1 - C_6 -Alkyl, C_1 - C_6 -Halogenalkyl, C_1 - C_6 -Alkoxy, C_1 - C_6 -Halogenalkoxy, C_1 - C_6 -Alkylthio, C_1 - C_6 -Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes C_3 - C_8 -Cycloalkyl,

40

 C_1 - C_4 -Dialkylamino,
einen gegebenenfalls durch C_1 - C_6 -Alkyl, C_1 - C_6 -Halogenalkyl oder Halogen substituierten 3- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und gegebenenfalls durch Methyl substituierter Stickstoff,
oder gegebenenfalls durch C_1 - C_6 -Alkyl, C_1 - C_6 -Halogenalkyl, C_1 - C_6 -Alkoxy, C_1 - C_6 -Halogenalkoxy, C_1 - C_6 -Alkylthio, C_1 - C_6 -Halogenalkylthio, Halogen, Nitro, Cyano, Formyl, C_1 - C_6 -Alkanoyl oder C_1 - C_6 -Halogenalkanoyl substituiertes Phenyl bedeuten
oder

45

 R^3 und R^4 gemeinsam einen Rest der Struktur $-(\text{CH}_2)_n-\text{Y}_p(\text{CH}_2)_q-$, wobei n und q 1, 2 oder 3, p 0 oder 1 und Y Sauerstoff, Schwefel oder N-Methyl bedeuten, oder den Rest der Formel

50

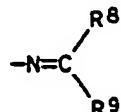
 $-(\text{CH}_2)_3-\text{CO}-$
bilden sowie deren umweltverträglichen Salze.
6. Herbizides Mittel, enthaltend inerte Zusatzstoffe und ein Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamid der Formel Ia.
7. Herbizides Mittel gemäß Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff ein Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamid der Formel Ia enthält, in der R^3 Wasserstoff bedeutet.

55

8. Herbizides Mittel gemäß Anspruch 6, dadurch gekennzeichnet, daß es als Wirkstoff ein Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamid der Formel Ia enthält, in der
 R^1 Wasserstoff oder C_1 - C_4 -Alkyl,

R² COYR⁵, wobei Y für Sauerstoff oder Schwefel und R⁵ für Wasserstoff, C₁-C₄-Alkyl, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder Halogen substituiertes Phenyl oder den Rest

5



10

stehen,

R³ Wasserstoff undR⁴ C₁-C₄-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl bedeuten.

9. Verfahren zur Bekämpfung unerwünschten Pflanzenwuchses, dadurch gekennzeichnet, daß man die unerwünschten Pflanzen und/oder die von unerwünschten Pflanzenwuchs freizuhaltende Fläche mit einer herbizid wirksamen Menge eines Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamids der Formel Ia behandelt.

Patentansprüche für folgenden Vertragsstaat: ES

20

1. Verfahren zur Herstellung von Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamiden der Formel I

25

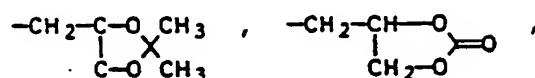


in der

X Sauerstoff oder Schwefel,
 R¹ Wasserstoff,
 gegebenenfalls durch C₁-C₃-Alkoxy, C₁-C₃-Halogenalkoxy, Halogen, Cyano oder Phenyl, das durch Halogen, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Halogenalkylthio, Cyano oder Nitro substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy,
 gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl oder Halogen substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl, einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, der durch C₁-C₄-Alkyl, Carboxyl oder C₁-C₄-Alkoxy carbonyl substituiert sein kann,
 oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl,
 R² Formyl, 4,5-Dihydro-oxazol-2-yl oder einen Rest der Formel COYR⁵ oder CONR⁶R⁷, wobei
 Y für Sauerstoff oder Schwefel,
 R⁵ für Wasserstoff,
 C₁-C₈-Alkyl, das durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkoxy-C₁-C₄-alkoxy, Halogen, Cyano, Hydroxy, Trimethylsilyl, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Alkylamino, C₁-C₄-Dialkylamino, C₁-C₄-Alkylsulfinyl, C₁-C₄-Alkylsulfonyl, Carboxyl, C₁-C₄-Alkoxy carbonyl, C₁-C₄-Dialkylaminocarbonyl, C₁-C₄-Dialkoxyphosphonyl, Alkaniminoxy, Benzyloxy, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₃-Alkoxy oder Halogen substituiertes Benzoyl oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes Phenyl, durch Thienyl, Furyl, Tetrahydrofuryl, Phthalimido oder Pyridyl substituiert sein kann, gegebenenfalls durch Phenyl, das durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro oder Cyano substituiert sein kann, substituiertes C₃-C₈-Alkenyl, C₃-C₆-Halogenalkenyl, gegebenenfalls durch Hydroxy oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₈-Alkinyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, C₅-C₆-Cycloalkenyl, gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkyl, Halogen, Nitro, Cyano, C₁-C₄-Alkoxy carbonyl oder Acylamino substituiertes Phenyl,

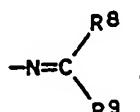
einen 5- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel und Stickstoff, oder einen Benzotriazolrest
 C₆-C₇-Cycloalkanimino, Phthalimido, Succinimido, für die Reste

5



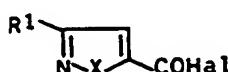
10 -CH₂-CH(OH)-CH₂(OH) , für ein Äquivalent eines Kations aus der Gruppe der Alkali-, Erdalkalimetalle, Mangan, Kupfer, Eisen, Ammonium und substituiertes Ammonium oder für den Rest

15



wobei R⁸ und R⁹ unabhängig voneinander C₁-C₄-Alkyl, C₂-C₆-Alkoxyalkyl, C₃-C₆-Cycloalkyl, Phenyl, Furyl oder zusammen eine Methylenkette der Formel -(CH₂)_m- mit m = 4 bis 7 Kettengliedern bedeuten und R⁹ 20 zusätzlich Wasserstoff bedeutet,
 R⁶ für Wasserstoff, C₁-C₈-Alkyl oder C₃-C₈-Cycloalkyl und
 R⁷ für Wasserstoff oder C₁-C₈-Alkyl stehen oder wobei
 R⁶ und R⁷ eine Methylenkette mit 4 oder 5 Gliedern bilden,
 R³ Wasserstoff,
 25 gegebenenfalls durch Hydroxy, Halogen, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Dialkylamino substituiertes C₁-C₈-Alkyl
 oder gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkyl, Halogen oder C₁-C₄-Halogenalkyl substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl und
 R⁴ Wasserstoff, Hydroxyl, C₁-C₄-Alkoxy,
 30 gegebenenfalls durch C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio, C₁-C₄-Dialkylamino, Halogen, C₃-C₆-Cycloalkyl oder Phenyl, das durch Halogen, Cyano, Nitro, C₁-C₄-Alkyl, C₁-C₄-Halogenalkyl, C₁-C₄-Alkoxy, C₁-C₄-Halogenalkoxy, C₁-C₄-Alkylthio oder C₁-C₄-Halogenalkylthio substituiert sein kann, substituiertes C₁-C₁₀-Alkyl,
 gegebenenfalls durch Halogen oder C₁-C₄-Alkoxy substituiertes C₃-C₁₀-Alkenyl oder C₃-C₁₀-Alkinyl,
 35 gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro oder Cyano substituiertes C₃-C₈-Cycloalkyl, C₁-C₄-Dialkylamino,
 einen gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl oder Halogen substituierten 3- bis 6-gliedrigen heterocyclischen Rest mit einem oder zwei Heteroatomen, ausgewählt aus der Gruppe Sauerstoff, Schwefel 40 und gegebenenfalls durch Methyl substituierter Stickstoff, Naphthyl,
 oder gegebenenfalls durch C₁-C₆-Alkyl, C₁-C₆-Halogenalkyl, C₁-C₆-Alkoxy, C₁-C₆-Halogenalkoxy, C₁-C₆-Alkylthio, C₁-C₆-Halogenalkylthio, Halogen, Nitro, Cyano, Formyl, C₁-C₆-Alkanoyl oder C₁-C₆-Halogenalkanoyl substituiertes Phenyl bedeuten
 oder
 45 R³ und R⁴ gemeinsam einen Rest der Struktur -(CH₂)_n-Y_p-(CH₂)_q-, wobei n und q 1, 2 oder 3, p 0 oder 1 und Y Sauerstoff, Schwefel oder N-Methyl bedeuten, oder den Rest der Formel -(CH₂)₃-CO- bilden,
 mit der Maßgabe, daß X Schwefel ist, wenn R¹ CH₃, R² COOH oder COOC₂H₅ und R³ und R⁴ Wasserstoff 50 bedeuten, und daß X Sauerstoff ist, wenn R¹ Wasserstoff, R² COOH oder CONH₂ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten, dadurch gekennzeichnet, daß man ein Isoxazol(Isothioxazol)-5-carbonsäurehalogenid der Formel VI

55



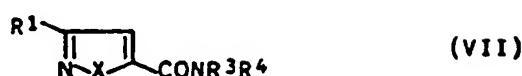
(VI)

mit einem Amin der Formel V

HNR^3R^4 (V)

zu einem Isoxazol(Isothiazol)amid der Formel VII

5



10 umsetzt und dieses Amid mit Alkyllithium und Kohlendioxid zu der entsprechenden Isoxazol(Isothiazol)-4-carbonsäure der Formel Ic

15

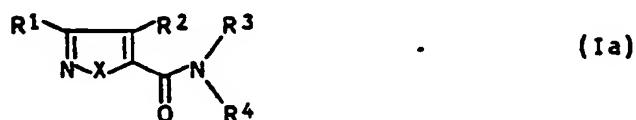


umsetzt und diese Säure durch Veresterung mit einem Alkohol der Formel IX HY-R⁵ (IX)

in Gegenwart eines wasserentziehenden Mittels in ein Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamid der Formel I überführt.

20 2. Herbicides Mittel, enthaltend inerte Zusatzstoffe und 0,1 bis 95 Gew.% eines Isoxazol(Isothiazol)-5-carbonsäureamids der Formel I

25



30 in der die Substituenten R¹, R², R³, R⁴ und X die gleichen Bedeutungen haben wie in Formel I gemäß Anspruch 1, mit der Maßgabe, daß X Sauerstoff oder Schwefel bedeutet, wenn R¹ Wasserstoff oder CH₃, R² COOH, COOC₂H₅ oder CONH₂ und R³ und R⁴ Wasserstoff bedeuten.

35

40

45

50

55